

SIMULATION ET MODÉLISATION

COURS DE MASTER 2

Bernard Delyon

Table des matières

I Les générateurs de suites i.i.d.	7
I.1 Problématique	7
I.2 Générateurs pour la loi $\mathcal{U}([0, 1])$	7
I.2.1 Récurrences linéaires simple	7
I.2.2 Récurrences linéaires multiples	9
I.2.3 Décalage de registre	9
I.2.4 Améliorations modernes	10
I.3 Lois non uniformes : méthodes générales	10
I.3.1 Loi discrète	10
I.3.2 Inversion	11
I.3.3 Composition	11
I.3.4 Rejet	11
I.4 Quelques lois usuelles	12
I.4.1 Loi exponentielle	12
I.4.2 Loi normale	12
I.4.3 Vecteur gaussien	13
I.4.4 Vecteur sur la sphère	13
I.4.5 Loi du χ_p^2	13
I.4.6 Autres	13
I.5 Épreuves empiriques sur les suites pseudo-aléatoires	13
I.5.1 Épreuves de distribution instantannée	14
I.5.2 Épreuves d'indépendance	15
I.6 Exercices et compléments	16
II Monte Carlo : Exemples de base	19
II.1 Estimation du volume	19
II.2 Intégration	19
II.3 Décompte	20
II.3.1 Premier cas	20
II.3.2 Deuxième cas	21
II.4 Exemples applicatifs simples	22

II.4.1 Temps d'échappement d'une comète du système solaire	22
II.4.2 Perte de connexion dans un graphe	22
II.4.3 Files d'attente	23
II.4.4 Options américaines	23
II.4.5 Calcul du niveau d'un test	24
II.5 Exercices	24
III Réduction de variance	27
III.1 Échantillonnage préférentiel (importance sampling)	27
III.2 Variables de contrôle	29
III.3 Échantillonnage corrélé	30
III.4 Variables antithétiques	30
III.5 Échantillonnage stratifié	31
III.6 Conditionnement	32
III.7 Quasi-Monte Carlo : les suites à discrédance faible	33
III.8 Exercices	35
IV Les échantillonneurs de Metropolis et de Gibbs	39
IV.1 Rappels sur les chaînes de Markov à nombre fini d'états	39
IV.2 L'échantillonneur de Gibbs	41
IV.3 Algorithme de Metropolis	42
IV.3.1 Principes	42
IV.3.2 Simulation de graphes.	44
IV.3.3 Marche aléatoire sans recoupement (self-avoiding random walk)	44
IV.3.4 Méthode de rejet	45
IV.4 Applications à l'estimation. Méthodes MCMC	45
IV.4.1 Maximum de vraisemblance	45
IV.4.2 Échantillonnage postérieur. Modèle bayésien hiérarchique	46
IV.4.3 Données manquantes 1 : Modèle bayésien	47
IV.4.4 Données manquantes 2 : L'algorithme EM	48
IV.5 Processus ponctuels	50
IV.5.1 Échantillonnage postérieur des processus ponctuels	50
IV.5.2 Simulation des «cluster Poisson process»	51
IV.6 Champs de Gibbs	52
IV.6.1 Définition des champs de Gibbs	52
IV.6.2 Échantillonnage de Gibbs	54
IV.6.3 Algorithme de Metropolis	55
IV.6.4 Autres exemples	55
IV.7 Exercices, exemples	57
IV.7.1 Chaînes de Markov	57

IV.7.2 Échantillonneur de Gibbs, algorithme de Metropolis	59
IV.7.3 Algorithme EM	62
IV.7.4 Processus ponctuels	62
IV.7.5 Champs de Gibbs	63
V Modèles markoviens	65
V.1 Généralités	65
V.2 Simulation des processus de saut	65
V.3 Simulation de processus à évènements discrets	68
V.4 Modèles spatiaux dynamiques	70
V.5 Modèles semi-markoviens, modèles d'état	71
V.5.1 Modèles linéaires	71
V.5.2 Modèles non-linéaires. Filtrage particulaire	73
V.6 Exercices	75
V.6.1 Processus à évènements discrets	75
V.6.2 Processus de saut.	76
V.6.3 Modèles autorégressifs	77
VI Simulation de processus : convergence	79
VI.1 Algorithme des répétitions	79
VI.2 Régénération	80
VI.2.1 Renouvellement	80
VI.2.2 Théorie générale	81
VI.2.3 Méthode atomique	82
VI.2.4 Modification de la transition	83
VI.3 Échantillonnage parfait : couplage sur le passé	84
VI.3.1 Cas général	84
VI.3.2 Cas monotone	86
VI.3.3 Méthode d'encadrement et de domination	86
VI.4 Réduction de variance	88
VI.5 Exercices et compléments	88
VII Optimisation par Monte-Carlo	91
VII.1 Approximation stochastique	91
VII.1.1 Deux exemples simples	91
VII.1.2 Forme générale et accélération	93
VII.1.3 La régression linéaire	94
VII.1.4 Exemple : Données manquantes	95
VII.1.5 Exemple : Algorithme de Kiefer-Wolfowitz	96
VII.1.6 Exemple : Optimisation d'une chaîne de Markov contrôlée	96
VII.1.7 Cadre général à dynamique markovienne	97

VII.1.8 Algorithmes de poursuite	97
VII.2 Recuit simulé	99
VII.3 Exercices	100
VIII Simulation d'équations différentielles stochastiques	103
VIII.1 Introduction	103
VIII.2 Schémas d'intégration	103
VIII.3 Exercices de simulation. Exemples	105
VIII.4 Techniques spécifiques de simulation	107
VIII.4.1 Échantillonnage préférentiel	107
VIII.4.2 Importance splitting	108
IX Bootstrap	109
IX.1 Introduction	109
IX.2 Estimation par répétitions (bootstrap paramétrique)	109
IX.3 Principes de base du bootstrap	110
IX.4 Exemples	112
IX.5 Échec du bootstrap dans un cas non-régulier	113
IX.6 Variantes et détails pratiques	114
IX.6.1 Bootstrap régularisé.	114
IX.6.2 Bootstrap semi-paramétrique.	114
IX.6.3 Normalisation pivotale.	114
IX.6.4 Bootstrap par sous-échantillonnage	115
IX.7 Exercices et compléments	115
A Filtre de Kalman	117

I

LES GÉNÉRATEURS DE SUITES I.I.D.

I.1 Problématique

Soit une distribution sur \mathbb{R} ou \mathbb{R}^d , il s'agit dans ce chapitre de simuler une suite de variables i.i.d. Y_n possédant cette loi. Il y a donc deux contraintes à satisfaire :

- ▶ Les Y_n doivent avoir la bonne distribution
- ▶ Les Y_n doivent être indépendantes.

Nous ne donnons ici qu'un aperçu culturel rapide des méthodes utilisées. Une bonne référence est le livre de Knuth [25]. L'article [26] contient des informations très intéressantes également, avec des références plus actuelles.

La question théorique de savoir comment une suite générée par un algorithme peut être considérée comme aléatoire relève de toute une théorie (de la complexité) qui ne sera pas abordée ici, voir [32] et les références contenues dans cet article. Le chapitre 14 de [8] réalise une très bonne introduction à la théorie de la complexité.

I.2 Générateurs pour la loi $\mathcal{U}([0, 1])$

Les nombres machine compris entre 0 et 1 étant tous de la forme $x = n2^{-p}$ $n \in \{0, \dots, 2^p\}$ il n'y a pas plus de 2^p nombres différents sur $[0, 1[$, et comme ces nombres sont également espacés, le problème se réduit à tirer des entiers uniformément sur $\{0, 1, \dots, 2^p - 1\}$. Typiquement $p = 32$.

On verra que les algorithmes de génération de suites $(U_n)_{n \geq 0}$ uniformes auront toujours plus ou moins la forme $X_n = f(X_{n-1})$, $X_n \in \{0, 1, \dots, m\}$, $U_n = X_n/m$. Il y a donc deux conséquences importantes

- ▶ Les U_n ne seront pas indépendantes : la suite est pseudo-aléatoire.
- ▶ La suite U_n sera périodique de période au plus m , et parfois moins.

I.2.1 Récurrences linéaires simple

Il s'agit de générateurs de la forme¹ :

$$X_i = aX_{i-1} + c \pmod{m}. \tag{I.1}$$

1. Dans toute la suite on note $x = y \pmod{m}$ pour définir x à partir de y par les conditions $x \equiv y \pmod{m}$ et $0 \leq x < m$.

avec $U_i = X_i/m$. La période d'un tel générateur est bien entendu inférieure à m . Si $c = 0$ sa période est même inférieure ou égale à $m - 1$ car 0 est point fixe. On ne considérera que deux cas, qui sont les plus importants dans la pratique.

1 - THÉORÈME

Si $c = 0$, $m = 2^\beta$ et $\beta \geq 4$, le générateur (I.1) a une période (maximale) égale à $m/4$ si et seulement si x_0 est impair et $a \equiv 3$ ou $5 \pmod{8}$.

2 - THÉORÈME

Si $c = 0$ et m premier le générateur (I.1) a une période (maximale) égale à $m - 1$ ssi $x_0 \neq 0$ et a est une racine primitive de m :

$$a \neq 0 \text{ et pour tout } p \text{ diviseur premier de } m - 1 : a^{(m-1)/p} \not\equiv 1 \pmod{m}.$$

Notons que $m = 2^{31} - 1$ est premier. Voici quelques exemples² :

Lehmer (1948)	$a = 23, m = 10^8 + 1$	assez moyen
RANDU (IBM 1968)	$a = 65539, m = 2^{31}$	mauvais
Marsaglia (1972)	$a = 69069, m = 2^{32}$	raisonnable
SURAND (1968)	$a = 16807, m = 2^{31} - 1$	raisonnable
INMOS [25]	$a = 1664525, m = 2^{32}$	le meilleur a connu pour ce m
L'Ecuyer (1993)	$a = 41358, m = 2^{31} - 1$	bon
CDC	$a = 5^{15}, m = 2^{47}$	longue période

TABLE I.1 – Quelques valeurs utilisées pour m et a , ($c = 0$).

Critère spectral. La période n'est pas tout. Par exemple le générateur avec $a = c = 1$ a une période maximale mais fournit une suite U_n loin d'être indépendante. Une façon de le voir est d'observer que la distribution de (U_n, U_{n+1}) n'est pas du tout uniforme sur le carré, puisque $U_{n+1} - U_n \equiv m^{-1} \pmod{1}$.

De même, dans le cas du générateur RANDU des vieux IBM, associé à $a = 65539, m = 2^{31}$, on observe que $U_{n+2} - 6U_{n+1} + 9U_n \equiv 0 \pmod{1}$; ceci vient de ce que $65539 = 2^{16} + 3$.

Les chercheurs ont observé que les générateurs linéaires tendent à placer les vecteurs $V_i = (U_{i+1}, \dots, U_{i+d})$ sur la réunion des hyperplans parallèles de la forme $H_n = \{v \in \mathbb{R}^d : \langle \xi, v \rangle = n\}$ pour un certain vecteur $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_d)$, ce qui signifie que $\langle \xi, V_i \rangle \equiv 0 \pmod{1}$ pour tout i . Par exemple, si $d = 2$, on voit tout les points (U_n, U_{n+1}) sur des droites parallèles équi-espacées. Il y a même de nombreux vecteurs ξ ayant cette propriété. Plus les H_n sont espacés, plus le générateur est de mauvaise qualité, car il y a de grande zones de l'espace non visitées. La distance entre deux hyperplans successifs étant la distance de 0 à H_1 qui vaut $\|\xi\|^{-1}$, on considérera le critère spectral

$$h_d = \max_{\xi \neq 0} \{ \|\xi\|^{-1} : \sum_{j=1}^d \xi_j U_{i+j} \equiv 0 \pmod{1}, i = 1, 2, \dots \}.$$

2. F. James, "A review of pseudorandom number generators", *Comput. Phys. Comm.* 60 (1990), no. 3, 329-344.
Voir aussi : K. Entacher, *A collection of selected pseudorandom number generators with linear structures*, random.mat.sbg.ac.at/~charly/server.

On calcule alors

$$\mu_d = \frac{\pi^{d/2} h_d^{-d}}{P\Gamma(d/2 + 1)}$$

où P est la période. On considère que pour les bons générateur, μ_d est voisin ou supérieur à 1 et que si μ_d est inférieur à 0,1 le générateur est assez mauvais³.

I.2.2 Récurrences linéaires multiples

Elles sont définies par la relation :

$$X_i = \sum_{j=1}^k a_j X_{i-j} \pmod{m}.$$

avec bien entendu $U_i = X_i/m$. La période d'un tel générateur est $m^k - 1$ si m est premier et a_1, \dots, a_k bien choisis. Noter que la période est bien plus grande que le nombre de valeurs prises.

Un exemple est le générateur de Marsaglia et Zaman : $X_n = X_{n-r} - X_{n-s} \pmod{b}$. Les valeurs proposées par Lüscher² sont $b = 2^{24}$, $r = 24$, $s = 10$.

I.2.3 Décalage de registre

On opère directement sur la représentation binaire des réels de $[0, 1]$:

$$u = 0 + \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{4} + \dots + \frac{b_l}{2^l} = \langle 0, b_1, \dots, b_l \rangle.$$

On réalise une suite de $b_i \in \{0, 1\}$ par la récurrence

$$b_i = a_1 b_{i-1} + \dots + a_q b_{i-q} \pmod{2}, \quad a_i \in \{0, 1\}$$

puis $u_i = \langle 0, b_{il+1}, b_{il+2}, \dots, b_{il+l} \rangle$, soit :

$$\underbrace{b_1 \dots b_l}_{u_0} \underbrace{b_{l+1} \dots b_{2l}}_{u_1} \underbrace{b_{2l+1} \dots b_{3l} \dots}_{u_2} \dots$$

Il y a 2^q suites $(b_{i-1}, \dots, b_{i-q})$ différentes possibles, et comme zéro est point fixe, la période des b_i est au plus de $2^q - 1$; on choisira toujours un générateur ayant cette période. Pour que la période de la suite u_i soit également $2^q - 1$, il faudra utiliser effectivement toutes les suites $(b_{i+1}, \dots, b_{i+l})$ apparaissant (et non pas une sur l), et pour cela on prendra un l tel que $\text{pgcd}(l, 2^q - 1) = 1$.

Exemples. On a beaucoup étudié les générateurs avec des récurrences à deux termes

$$b_i = b_{i-p} + b_{i-q} \pmod{2} \tag{I.2}$$

($p < q$) pour lesquels la période est de $2^q - 1$. Par exemple les paires

$$\begin{aligned} q = 31, \quad p = 3, 6, 7, 13, 18, 24, 25, 28 \\ q = 607, \quad p = 273. \end{aligned}$$

Un choix recommandé est $q = 31, p = 13, l = 32$.

3. M. Lüscher, "A portable high-quality random number generator for lattice field theory simulations", *Comput. Phys. Comm.* 79 (1994), no. 1, 100-110.

Critère d'équirépartition. En plus de la période, on peut vérifier théoriquement la bonne répartition des vecteurs :

On calcule pour chaque cellule dyadique de $[0, 1]^d$ de côté $2^{-\lambda}$, avec $\lambda \leq l$ et $d < q$ le nombre de vecteurs de la forme $(U_{i+1}, \dots, U_{i+d})$ qui sont tombés dedans, sur une *période entière* du générateur (on ajoute le vecteur $(0, \dots, 0)$, ce qui fait en tout exactement 2^q vecteurs).

Si $\lambda \leq [q/d]$ et chacune des $2^{d\lambda}$ cellule a exactement $2^{q-d\lambda}$ vecteurs, alors on dit qu'il y a *équirépartition maximale pour λ et d* . Si $\lambda > [q/d]$ et chaque cellule ne contient pas plus d'un point, on dit qu'il y a *absence de collision*. Il se trouve que de nombreux générateurs à décalage de registre fournissent des suites ayant ces deux propriétés pour diverses valeurs de (d, λ) [26].

I.2.4 Améliorations modernes

Il existe deux façons d'améliorer un générateur. La manière courante est de coupler des générateurs différents. Par exemple le générateur suivant a de bonnes propriétés :

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= 40014X_n \pmod{2^{31} - 85} \\ Y_{n+1} &= 40692Y_n \pmod{2^{31} - 249} \\ Z_{n+1} &= X_n - Y_n \pmod{2^{31} - 86}. \end{aligned}$$

Il s'agit du premier générateur parmi les 32 proposés par L'Écuyer⁴. L'intérêt est principalement de rallonger la période sans trop compliquer les algorithmes, car, sous certaines hypothèses, les périodes se multiplient (on a donc ici une période d'ordre 10^{18}). On voit se dessiner une forme plus générale qui est une forme d'état :

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= AX_n \pmod{m} \\ U_n &= C^T X_n \pmod{1} \end{aligned}$$

où X_n , m et C sont des vecteurs et A est une matrice. On arrive ainsi à réaliser⁵ des générateurs de période $2^{19937} - 1$ où X est de longueur $623 \times 32 + 1 = 19937$ bits, $m = 2$ et U_n est formé à l'aide des 32 derniers bits de X_n .

Générateurs non-linéaires. Un exemple récent d'un tel générateur est⁶

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= aX_n^3 + 1 \pmod{m} \\ X'_{n+1} &= a'X_n'^3 + 1 \pmod{m'} \\ U_n &= (X_n/m + X'_n/m') \pmod{1} \end{aligned}$$

La période vaut au mieux mm' . Par exemple : $m = 65519$, $m' = 65447$, $a = 512$, $a' = 27076$.

I.3 Lois non uniformes : méthodes générales

I.3.1 Loi discrète

Soit une variable à générer qui prend les valeurs $1, 2, \dots, r$ avec probabilité p_1, \dots, p_r : $P(X = i) = p_i$. On commence par générer une suite uniforme indépendante U_n puis on pose

$$X_n = i \text{ si } p_1 + \dots + p_{i-1} < U_n \leq p_1 + \dots + p_i.$$

4. P. L'Écuyer, "Efficient and Portable Combined Random Number Generators", Communications of the ACM, 31 (1988), 742-749, 774. Ces générateurs sont disponibles à l'adresse `hpux.u-aizu.ac.jp` sous le nom de « ranlib ». Ils forment le générateur « grand » de Scilab.

5. M. Matsumoto, T. Nishimura, "Mersenne Twister : A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator", *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 8(1), 1998.

6. P. L'Écuyer, P. Hellekalek, "Random Number Generators : Selection Criteria and Testing", in *Random and Quasi-Random Point Sets*, Lectures Notes In Statistics, no. 138, Springer, 1998, 223-266.

Si les U_n sont i.i.d $\mathcal{U}([0, 1])$, les X_n sont clairement indépendantes avec la loi voulue.

En pratique on testera successivement $p_1 > U_n$ puis, $p_1 + p_2 > U_n$, etc... Pour que la simulation soit la plus rapide possible, il faudra donc présenter les p_i par ordre décroissant.

I.3.2 Inversion

Si la loi à générer possède une fonction de répartition $F(x) = P(X \leq x)$ continue strictement croissante et si Q est la fonction inverse de F (fonction quantile) alors la variable $Q(U)$, avec $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$, suit la loi F :

$$P(Q(U) \leq x) = P(U \leq F(x)) = F(x).$$

Pour un F général, cette méthode fonctionne encore en définissant Q par

$$Q(u) = \min\{y : F(y) \geq u\} \tag{I.3}$$

(exercice I.6.16) ou par sa version continue à droite ($Q_+(u) = Q(u^+)$), obtenue également en remplaçant \geq par $>$ dans (I.3).

Cette méthode ne s'étend pas simplement aux variables vectorielles. Pour simuler un vecteur $X_n = (X_{n1}, \dots, X_{nd})$ de variables non-indépendantes avec la méthode d'inversion, il faut se ramener à des variables réelles, par exemple : simuler d'abord X_{n1} selon sa loi marginale, puis X_{n2} selon sa loi conditionnelle à X_{n1} , puis X_{n3} selon sa loi conditionnelle à X_{n1} et X_{n2} , etc...

I.3.3 Composition

C'est le cas où l'on a un mélange de lois, c'est-à-dire que la distribution est de la forme $P_X(dx) = \sum_{i=1}^r p_i P_i(dx)$, ce qui revient à dire que la densité satisfait (si elle existe) $f(x) = \sum_{i=1}^r p_i f_i(x)$. Par exemple X est la taille d'un individu pris au hasard dans r pays différents, P_i est la distribution de la taille dans le i -ième pays et p_i est la population relative de ce pays.

3 - ALGORITHME

1. Générer une v.a. J à valeurs dans $\{1, 2, \dots, r\}$ avec probabilités p_1, \dots, p_r
2. Générer ensuite X selon P_J .

En effet : $P(X \in A) = \sum_i P(X \in A | J = i)P(J = i) = \sum_i P_i(A)p_i = P_X(A)$.

I.3.4 Rejet

On va montrer qu'une approximation, même grossière, de la loi à simuler par une loi facilement simulable peut suffire à générer facilement des échantillons.

Soit à simuler la variable X de loi de densité $f(x)$ par rapport à une certaine mesure $\mu(dx)$ (typiquement $\mu(dx) = dx$), telle que pour un $C > 0$

$$f(x) \leq C^{-1} f_0(x)$$

et où $P_0(dx) = f_0(x)\mu(dx)$ est une loi facilement simulable. Par exemple si $f(x) = c_0 e^{-|x| - \sqrt{|x|+1}}$, on peut choisir $f_0(x) = e^{-|x|}/2$.

4 - ALGORITHME

On pose $g(x) = C f(x)/f_0(x)$

1. Tirer $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$ et $Y \sim P_0$ indépendantes
2. Si $U \leq g(Y)$ alors on a réalisé un échantillon $X = Y$ sinon recommencer.

5 - THÉORÈME

L'algorithme simule bien la loi de X . La probabilité de rejet vaut $1 - C$.

Démonstration: Si l'on fait n tirages et que l'on génère k_n échantillons indépendants de même loi X_1, \dots, X_{k_n} (k_n est une variable aléatoire), on a pour toute fonction φ borélienne bornée

$$\frac{1}{k_n} \sum_{j=1}^{k_n} \varphi(X_j) = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varphi(Y_i) 1_{U_i \leq g(Y_i)}}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{U_i \leq g(Y_i)}}.$$

Comme la probabilité de non rejet vaut $P(U \leq g(Y)) = E[g(Y)] = C > 0$, $k_n \rightarrow \infty$ et la limite du membre de gauche est bien l'espérance de $\varphi(X)$ pour la loi simulée. Par application de la loi des grands nombres le numérateur du membre de droite converge vers

$$\int \varphi(y) 1_{0 \leq u \leq g(y)} du f_0(y) \mu(dy) = \int \varphi(y) g(y) f_0(y) \mu(dy) = C \int \varphi(y) f(y) \mu(dy).$$

Le dénominateur correspondant à $\varphi = 1$, la limite du rapport est bien $\int \varphi(y) f(y) \mu(dy)$. ■

Dans le cas où P est P_0 conditionné par l'appartenance à un ensemble B , $f = f_0 1_B / P_0(B)$, $C = P_0(B)$, g est la fonction indicatrice de B , et l'algorithme se simplifie en une forme dont la signification intuitive est claire : *Tirer des échantillons selon P_0 et ne garder que ceux qui appartiennent à B .*

Dans le cas où P_0 est uniforme sur une partie B de \mathbb{R}^d et P est la mesure de densité f par rapport à la mesure de Lebesgue λ sur B , alors $f_0 = 1/\lambda(B)$ et l'on a la méthode du rejet traditionnelle avec $g = f / \sup f$:

1. Tirer $Y \sim \mathcal{U}(B)$ et $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$
2. Si $U \leq g(Y)$ alors on a un nouvel échantillon $X = Y$ sinon recommencer.

Aspects pratiques. On cherchera f_0 proche de f de sorte que C puisse être choisi le plus grand possible.

Si f est difficile à calculer mais peut être approximée par deux suites $f_n^- \leq f \leq f_n^+$ respectivement croissantes et décroissantes convergeant vers f , le test $U \geq g(Y)$ peut se faire en cherchant un n assez grand pour que $f_n^-(Y)$ et $f_n^+(Y)$ soient du même côté de $U f_0(Y)/C$, ce qui permet de réaliser un algorithme en temps fini [10].

I.4 Quelques lois usuelles

I.4.1 Loi exponentielle

L'application de la méthode d'inversion donne immédiatement

$$X = -\log(U), \quad U \sim \mathcal{U}([0, 1]).$$

I.4.2 Loi normale

Une méthode classique consiste à générer les variables par paires.

1. Générer $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$ et V exponentielle de paramètre 1
2. On obtient deux v.a. normales indépendantes en posant

$$X_1 = \sqrt{2V} \cos(2\pi U), \quad X_2 = \sqrt{2V} \sin(2\pi U).$$

En effet pour toute fonction continue bornée f

$$\begin{aligned} E[f(X_1, X_2)] &= \int_0^{+\infty} \int_0^1 f(\sqrt{2v} \cos(2\pi u), \sqrt{2v} \sin(2\pi u)) e^{-v} dv du \\ &= \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} f(\rho \cos \theta, \rho \sin \theta) e^{-\rho^2/2} \rho d\rho \frac{d\theta}{2\pi} \\ &= \int f(x, y) e^{-(x^2+y^2)/2} \frac{dx dy}{2\pi}. \end{aligned}$$

En particulier on voit que pour $(X_1, X_2) \sim \mathcal{N}(0, I)$, la loi de $X_1^2 + X_2^2$ est exponentielle de paramètre $1/2$. Il existe un algorithme analogue pour simuler les loi stables⁷.

I.4.3 Vecteur gaussien

Soit à simuler la loi $\mathcal{N}(\mu, R)$. Alors simuler $X_0 = \mathcal{N}(0, I)$ à l'aide de l'algorithme précédent et poser $X = \mu + MX_0$, où M est une racine carrée de R : $MM^T = R$. Clairement X est un vecteur gaussien de moyenne et variance correctes.

I.4.4 Vecteur sur la sphère

L'invariance de la loi gaussienne par rotation implique que si $X \sim \mathcal{N}(0, I)$, alors $X/\|X\|$ est uniformément réparti sur la sphère.

I.4.5 Loi du χ_p^2

C'est la loi de $X_1^2 + \dots + X_p^2$ où $(X_1, \dots, X_p) \sim \mathcal{N}(0, I)$. Si p est pair c'est donc la loi de la somme de $p/2$ variables exponentielles de paramètre $1/2$, sinon, ajouter le carré d'une normale au χ_{p-1}^2 .

I.4.6 Autres

Il existe quantité de méthodes astucieuses pour simuler les différentes lois. Voir par exemple [10]. Voir aussi les exercices I.6.15 et I.6.0.1.

I.5 Épreuves empiriques sur les suites pseudo-aléatoires

Les épreuves servent à vérifier la qualité des suites pseudo-aléatoires. Elle sont faites pour être passées avec succès pour les suites i.i.d de loi F désirée. Ces épreuves s'ajoutent à d'éventuels critères, plus spécifiques au type de générateur, comme les deux vus au § I.2.1 ou au § I.2.3.

Il y a deux types extrêmes d'épreuves : le premier se centre sur la vérification du fait que la distribution est bien celle attendue et l'autre sur la vérification de l'indépendance des variables. C'est le deuxième point qui est de loin le plus délicat, aussi bien du point de vue de la réalisation des suites que de celui la vérification par des épreuves.

Noter toutefois qu'une épreuve conçue pour vérifier que la loi de trois variables simulées consécutives est bien la loi de trois répliques indépendantes de la loi F participe de ces deux types.

7. J.M. Chambers, C.L. Mallows et B.W. Stuck, "A method for simulating stable random variables", *Journal of the American Statistical Association*, vol. 71, No 354, 340-344, 1976.

I.5.1 Épreuves de distribution instantannée

L'idée est de supposer que la suite simulée est bien une suite i.i.d et d'utiliser des tests statistiques classiques pour s'assurer que la loi est bien la bonne.

Test de Kolmogorov. Soit la fonction de répartition empirique

$$F_n(x) = \frac{1}{n} \sum_1^n 1_{X_i \leq x}$$

et la statistique

$$d_n = \sqrt{n} \sup_x |F_n(x) - F(x)|$$

alors on a le théorème de Kolmogorov et Smirnov

6 - THÉORÈME

Si les X_i sont i.i.d de loi donnée par F supposée continue, alors la loi de d_n est indépendante de F avec asymptotiquement :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(d_n \leq x) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} (-1)^k e^{-2k^2 x^2} = H(x)$$

Il s'ensuit que $H(x)$ est la probabilité de confiance du test décidant la loi significativement non-conforme si $d_n > x$. En pratique on compare le niveau $\alpha = 1 - H(d_n)$ à un seuil donné à l'avance toujours pris inférieur à 5%.

On montre en exercice I.6.18 que si F n'est pas continue, le test basé sur d_n aura un niveau supérieur ; on peut donc très bien l'utiliser dans ce contexte.

Notons que le fait que la statistique est indépendante de F est lié aux résultats du chapitre précédent ; en effet, posons $U_i = F(X_i)$, alors les U_i sont $\mathcal{U}([0, 1])$ et

$$F_n(x) = n^{-1} \sum_1^n 1_{U_i \leq F(x)}$$

et donc

$$d_n = \sqrt{n} \sup_x |n^{-1} \sum_1^n 1_{U_i \leq F(x)} - F(x)| = \sqrt{n} \sup_u |n^{-1} \sum_1^n 1_{U_i \leq u} - u|$$

dont la loi est fixe.

La statistique de Kuiper est parfois préférée :

$$d'_n = \sqrt{n} \left(\sup_x (F_n(x) - F(x)) - \inf_x (F_n(x) - F(x)) \right).$$

Test du χ^2 . Ce test est utile si l'on cherche à simuler des variables aléatoires pour lesquelles le test de Kolmogorov est inadapté (à valeurs non-réelles, discrètes,...).

On découpe l'espace de valeurs de X en ν parties différentes, S_1, \dots, S_ν , de probabilité p_1, \dots, p_ν . On considère alors les probabilités empiriques de tomber sur ces ensembles

$$\hat{p}_k = n^{-1} \sum_{i=1}^n 1_{X_i \in S_k}$$

et l'on considère la statistique de test

$$T_n = n \sum_{k=1}^{\nu} \frac{(\hat{p}_k - p_k)^2}{p_k}.$$

7 - THÉORÈME

Si les X_i sont i.i.d de loi donnée par F alors

$$T_n \longrightarrow \chi_{\nu-1}^2 \text{ en loi.}$$

Donc le test qui décide que la loi est significativement non-conforme si $T_n > x$, est de niveau asymptotique $1 - F_{\nu-1}(x)$ (probabilité de confiance de $F_{\nu-1}(x)$) où F_ν est la fonction de répartition du χ_ν^2 . Les ν ensembles seront typiquement choisis de probabilité égale.

I.5.2 Épreuves d'indépendance

On supposera ici souvent pour simplifier que la distribution à générer est $\mathcal{U}([0, 1])$ et la suite sera notée U_n au lieu de X_n . Ces épreuves se généralisent aux autres distributions sans difficulté.

On va voir qu'une bonne partie des épreuves d'indépendance consistera à vérifier que la suite $(U_{j+1}, \dots, U_{j+d})_j$ a bien une distribution uniforme sur l'hypercube $[0, 1]^d$.

Notations. On posera pour tous entiers d et K fixés

$$V_j = (U_{jd+1}, \dots, U_{j(d+d)}), \quad Y_i = [KU_i], \quad Z_i = (Y_{id+1}, \dots, Y_{i(d+d)}). \quad (\text{I.4})$$

Test des corrélations. Cette épreuve a la particularité de ne pas nécessiter la connaissance de F_X . On calcule simplement les corrélations empiriques de la suite X_i produite. Ce test peut s'appuyer sur le théorème suivant

8 - THÉORÈME

Si la suite X_i est i.i.d de variance finie, alors pour tout $k > 0$, la corrélation empirique \hat{r}_n entre deux échantillons à distance k , basée sur n échantillons, satisfait

$$\sqrt{n} \hat{r}_n \longrightarrow \mathcal{N}(0, 1).$$

Il s'ensuit que le test qui décide la dépendance si $\sqrt{n} |\hat{r}_n| > x$ a un niveau égal à $2(1 - F_g(x))$ où F_g est la fonction de répartition de la gaussienne (probabilité de confiance $2F_g(x) - 1$).

Test des séries. Les Z_i , $i = 1, \dots, n$ ne peuvent prendre chacune que $q = K^d$ valeurs possibles distinctes.

- Méthode χ^2 : Ici $n \gg q$ (p.ex $d = 5$, $K = 2$) et l'on fait un test du χ^2 .
- Méthode des collisions : q est grand (par exemple de l'ordre de la période) et l'on compte $C = n - n_v$ où n_v est le nombre de valeurs prises parmi les q valeurs possibles ; C est donc le nombre de répétitions

(collisions). On a sous hypothèse d'uniformité [25]

$$P(C = c) = \frac{q!}{q^n(q - n + c)!} C_n^c$$

qui permet de construire un intervalle de confiance $[a, b]$ pour C (numériquement parlant, il faut un algorithme spécial); une grande valeur de C correspond à la présence de concentrations de points dans certaines régions, et une trop petite valeur est associée à un générateur «trop régulier». On vérifie que si $a > 0$ il faut, pour avoir un niveau raisonnable, $n \gg \sqrt{q}$ car $P(C = 0) \simeq \exp(-n^2/q)$.

Test des points proches. Soient V_1, \dots, V_n des variables $\mathcal{U}([0, 1]^d)$ et D la distance minimale entre deux de ces points (on prend la distance sur le tore, c'est-à-dire que les différences sont calculées modulo 1, comprises entre $-1/2$ et $1/2$). Soit $v = \pi^{d/2}/\Gamma(d/2 + 1)$ le volume de la sphère unité en dimension d , alors la variable

$$W = \exp(-n^2 v D^d / 2)$$

suit approximativement une loi $\mathcal{U}([0, 1])$.

On peut donc simuler de telles suites de n vecteurs et tester si la loi de W est bien uniforme [26].

Une autre façon de tester les points proches est de faire un test des séries avec $q \simeq n^2/\log(2)$ de sorte que $P(C = 0) \simeq 1/2$.

Birthday spacings. Prendre la suite Y_1, \dots, Y_n , et considérer la suite réordonnée $Y_{(i)}$, puis les écarts $S_i = Y_{(i)} - Y_{(i-1)}$, $i = 1, \dots, n$ ($Y_{(0)} = 0$). On calcule alors le nombre C de collisions de la suite (S_i) , c-à-d n moins le nombre de valeurs prises.

Sous l'hypothèse d'uniformité, C possède une certaine loi que l'on peut calculer [25]. Il ne reste alors qu'à répéter l'expérience et à faire un test d'adéquation de distribution. Typiquement K sera la période mais ce n'est pas obligé.

Test des lacunes (gap test). Soit $I = [a, b] \subset [0, 1]$ un intervalle, typiquement $I = [0, 1/2]$. On dit que la suite U_i admet une lacune de longueur l après j si :

$$U_j \in I, \quad U_{j+1}, \dots, U_{j+l} \notin I, \quad U_{j+l+1} \in I$$

Les longueurs successives L_k de ces lacunes sont des variables i.i.d dont la loi est $p_l = p(1-p)^l$ où $p = b-a$. Il ne reste plus qu'à faire un test d'adéquation de distribution par exemple un test de Kolmogorov (exercice I.6.18), ou un χ^2_ν sur la variable $\tilde{L}_k = \min(L_k, \nu)$.

I.6 Exercices et compléments

Exercice I.6.1 Montrer qu'un générateur de la forme $X_n = f(X_{n-1}, X_{n-2})$, où f est à valeurs dans $\{0, 1, \dots, m-1\}$ est périodique avec une période au plus de m^2 . Que peut-on dire si $f(0, 0) = 0$? si $f(x, 0) = f(0, x)$ pour tout x ?

Exercice I.6.2 On considère l'algorithme du §I.3.1. Quel est le nombre moyen de tests faits pour générer une variable aléatoire ?

Exercice I.6.3 Soient U et V i.i.d $\mathcal{U}([0, 1])$; quelle est la loi (simple) de la variable aléatoire vectorielle $(\sqrt{U} \cos(2\pi V), \sqrt{U} \sin(2\pi V))$?

Exercice I.6.4 On considère la densité $f(x, y) = x e^{-xy} 1_{y>0} 1_{0<x<1}$ et une paire de v.a. (X, Y) suivant cette loi.

1. Quelle est la loi de Y sachant $X = x$?
2. Quelle est la loi de X ?
3. Proposer un procédé de simulation de (X, Y) .

Exercice I.6.5 On considère la densité $f(x, y) = yx^{y-1}e^{-y}1_{y>0}1_{0<x<1}$ et une paire de v.a. (X, Y) suivant cette loi.

1. Quelle est la loi de Y ?
2. Que vaut $P(X \leq x | Y = y)$?
3. Proposer un procédé de simulation de (X, Y) .

Exercice I.6.6 Soit la densité $f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-y^2x/2} e^{-\sqrt{x}} 1_{x>0}$ et la paire (X, Y) de variables aléatoires suivant cette loi.

1. Quelle est la loi de Y sachant $X = x$?
2. Quelle est la loi de \sqrt{X} ?
3. Proposer un procédé de simulation de (X, Y) .

Exercice I.6.7 Soit deux v.a. indépendantes X et Y de fonction de répartition F_X et F_Y . Quelle est la fonction de répartition de $\max(X, Y)$? En déduire une façon de générer une v.a. de fonction de répartition $\min(x, 1)(1 - e^{-x})1_{x>0}$. Tracer la densité de cette variable.

Exercice I.6.8 Proposer une méthode de rejet pour fabriquer des variables uniformes sur le disque unité avec des $\mathcal{U}([0, 1])$ sans utiliser de fonction trigonométrique.

Exercice I.6.9 (Inversion approchée [10]) On veut simuler une variable aléatoire X de densité f , ayant à sa disposition une approximation ψ croissante de la fonction quantile Q (cf § I.3.2).

1. Quelle doit être la densité h de la loi de U pour que $\psi(U)$ suive la loi de X (on notera H la fonction de répartition de U). Vérifier la solution obtenue si $\psi = Q$.
2. Proposer une méthode de rejet pour simuler de telles variables U .

Exercice I.6.10 On veut simuler une variable $\mathcal{N}(0, 1)$ avec la méthode de rejet en utilisant pour f_0 la loi de Laplace de paramètre λ . Exprimer g et C (en normalisant de sorte que $\sup g = 1$) et en déduire la valeur (simple) de λ qui va minimiser la probabilité de rejet ; vérifier que cette dernière vaut environ 0, 24.

Exercice I.6.11 Quelle est la distribution des échantillons rejetés dans la méthode de rejet ?

Exercice I.6.12 Soit $\lambda < 1$. Utiliser la méthode du rejet pour simuler des variables de loi de Poisson de paramètre λ ($P(X = n) = \lambda^n e^{-\lambda} / n!$) à partir de variables de probabilité $P(Y = n) = \lambda^n (1 - \lambda)$. Calculer la probabilité de rejet.

Exercice I.6.13 Soit f et g deux densités et $0 < \varepsilon < 1$. On cherche à simuler une v.a. dont la densité soit $\propto \max(f, \varepsilon g)$. Soit l'algorithme

9 - ALGORITHME

1. Tirer $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$
 - (a) Si $U \leq \alpha$ tire $X \sim f$ et si $f(X) > \varepsilon g(X)$ alors on a réalisé un échantillon X
 - (b) Si $U > \alpha$ tire $X \sim g$ et si $f(X) \leq \varepsilon g(X)$ alors on a réalisé un échantillon X
2. En cas de deux échecs recommencer.

Comment faut-il choisir α ?

Exercice I.6.14 (Mélange avec poids négatifs ; méthode de Bignami et de Matteis). Soit une densité de la forme $f(x) = \sum_i p_i f_i(x)$ où chaque f_i est une densité de probabilité et $\sum p_i = 1$. Les p_i ne sont pas tous positifs (ceci arrive en estimation de densité), et l'on pose $p_i = p_i^+ - p_i^-$ où $p_i^+ = p_i$ si $p_i > 0$ et 0 sinon. Proposer une méthode pour simuler la loi $\sum_i p_i^+ f_i(x) / \sum p_i^+$. En déduire une méthode de rejet pour simuler f , dont la probabilité de rejet est $\sum p_i^- / \sum p_i^+$.

Exercice I.6.15 Soit E_1, E_2, \dots une suite de v.a. exponentielles de paramètre 1, vérifier que la variable aléatoire N dont la valeur est l'indice n tel que

$$E_1 + E_2 + \dots + E_n \leq \lambda < E_1 + E_2 + \dots + E_{n+1}$$

suit une loi de Poisson de paramètre λ ($p_n = e^{-\lambda} \lambda^n / n!$). On calculera d'abord $P(N = n | E_1, \dots, E_n)$; pour cela on pourra démontrer et utiliser que $\int_{\mathbb{R}_+^n} \mathbf{1}_{x_1 + \dots + x_n < \lambda} dx_1 \dots dx_n = \lambda^n / n!$ (la démonstration peut se faire par changement de variables en introduisant les sommes partielles).

En déduire une méthode pour simuler une loi de Poisson. Cette méthode n'est utilisée que pour λ relativement petit ; pourquoi ?

Exercice I.6.16 Montrer que le min de (I.3) est atteint. En déduire que $Q(u) \leq x$ équivaut à $F(x) \geq u$, $0 \leq u \leq 1$ (montrer les deux implications séparément), puis que $Q(U)$ a pour fonction de répartition F si $U \sim ([0, 1])$.

Montrer que $Q_+(U)$ convient également (on pourra admettre que toute fonction croissante n'a qu'un nombre dénombrable de points de discontinuité).

Exercice I.6.17 Soit $F_-(x)$ la limite à gauche de F . Montrer que la v.a. U obtenue en tirant X selon F , puis U uniformément sur $[F_-(X), F(X)]$ est uniforme sur $[0, 1]$.

***Exercice I.6.0.1** Soient $\lambda, \mu > 0$. Montrer que le procédé suivant simule l'inverse gaussienne (loi de densité $\sqrt{\lambda} \exp \left\{ -\frac{\lambda(x-\mu)^2}{2\mu^2 x} \right\} \frac{dx}{\sqrt{2\pi x^3}}$ [10]) :

1. Simuler $Y \sim \mathcal{N}(0, 1)$.
2. Calculer les deux solutions X_- et X_+ de l'équation $y^2 = \lambda(x - \mu)^2 / (\mu^2 x)$ pour $y = Y$.
3. Choisir $X = X_-$ avec probabilité $p = (1 + X_- / \mu)^{-1}$ et $X = X_+$ avec probabilité $1 - p$.

Indications : Vérifier que

$$E[f(X)] = E[f(x_-(Y))p(Y)] + E[f(x_+(Y))(1 - p(Y))]$$

où $x_-(y)$ est la plus petite racine de l'équation du second degré. Pour effectuer les calculs, se garder de résoudre cette équation, mais noter que la fonction $x_-(y)$ est bijective de \mathbb{R}_+ dans $]0, \mu]$ et que l'équation donne tout de suite une relation entre dx_- et dy , qui permet d'effectuer simplement le changement de variable. Tout se passe de la même façon pour x_+ (noter que $x_+ x_- = \mu^2$ et donc $1 - p = (1 + x_+ / \mu)^{-1}$).

Exercice I.6.18 On reprend le test de Kolmogorov. Utiliser les résultats de l'exercice I.6.16 pour montrer que si F est discontinue : $P(d_n > \lambda) \leq P(d_n^c > \lambda)$ où d_n^c est la statistique dans le cas continu. En déduire qu'à seuil fixe, le test qui réfute F si $d_n > \lambda$ a un niveau supérieur si F est discontinue.

Exercice I.6.19 (Programmation) On considère la suite

$$U_n = a(U_{n-1}U_{n-2})^{U_{n-3}} \pmod{1}$$

1. Programmer cette suite avec $a = 2$ et tracer sa fonction de répartition empirique.
2. Montrer, en utilisant les corrélations d'ordre 1, que c'est une mauvaise suite aléatoire.
3. Ressaier avec $a = 100000$ (ou d'autres valeurs de votre choix).

II

MONTE CARLO : EXEMPLES DE BASE

II.1 Estimation du volume

On cherche à estimer le volume V d'un objet géométrique E inclus dans $[0, 1]^d$. On suppose que l'on a un moyen simple de tester si un point x appartient à E ou non.

10 - ALGORITHME

1. Tirer n points dans $[0, 1]^d$
2. Compter le nombre N de points appartenant à E
3. $\hat{V} = N/n$
4. $\hat{\sigma}(\hat{V})^2 = \hat{V}(1 - \hat{V})/n$
5. $I_c = \hat{V} \pm \hat{\sigma} Q_g(1 - \alpha/2)$

Q_g désigne la fonction quantile de la gaussienne centrée réduite. N est une somme de variables de Bernoulli d'espérance V , la variance de \hat{V} vaut donc $\sigma^2 = V(1-V)/n$, et $\hat{\sigma}(\hat{V})^2$ en est une estimation raisonnable. I_c est un intervalle de confiance de niveau asymptotique α , basé sur l'approximation gaussienne (théorème-limite central $\hat{V} \simeq V + \sigma\mathcal{N}(0, 1)$).

Si l'on sait que E est compris entre deux ensembles E_- et E_+ , $E_- \subset E \subset E_+$, de volume V_- et V_+ , on a toujours intérêt, si c'est possible et peu coûteux, à tirer uniformément dans l'ensemble $E_+ \setminus E_-$; la proportion de points tombant dans E donnera une estimation \hat{R} de $R = (V - V_-)/(V_+ - V_-)$ avec variance $R(1 - R)/n$, d'où une variance $(V - V_-)(V_+ - V)/n$ pour $\hat{V} = (V_+ - V_-)\hat{R} + V_-$.

II.2 Intégration

Au paragraphe précédent on calculait $E[1_E(X)]$ où X est $\mathcal{U}([0, 1]^d)$. La problématique est ici sensiblement la même puisqu'il s'agit de calculer $\theta = E[f(X)]$ pour une v.a. X que l'on sait simuler. L'estimateur naturel est

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i).$$

Sa variance vaut

$$\text{Var}(\hat{\theta}) = \frac{1}{n} \text{Var}(f(X)).$$

Comme précédemment, cette variance permet d'obtenir, par approximation gaussienne, un intervalle de confiance basé sur

$$\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n (f(X_i) - \hat{\theta})^2.$$

Cette méthode permet en particulier de calculer des intégrales sur $[0, 1]^d$, et par extension sur toute partie de \mathbb{R}^d .

Noter la vitesse de convergence en $1/\sqrt{n}$. Les méthodes (déterministes) d'intégration par quadrature, c.-à-d. de la forme

$$\int f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

commettent une erreur en $O(n^{-s/d})$ où s est la régularité de la fonction (les dérivées d'ordre inférieur ou égal à s sont bornées); les suites (x_i, w_i) dépendent du s que l'on considère. On voit donc qu'en grande dimension, l'algorithme de Monte Carlo est compétitif.

II.3 Décompte

Soit E_1, \dots, E_K une suite de sous-ensembles d'un ensemble E ; il s'agit ici de calculer le cardinal de leur réunion ou de leur intersection (le deuxième problème se ramenant au premier par passage au complémentaire). La méthode déterministe consiste en général à utiliser la formule d'inclusion-exclusion (ou de Bonferroni)

$$|\cup E_i| = \sum_i |E_i| - \sum_{i \neq j} |E_i \cap E_j| + \sum_{i \neq j \neq k} |E_i \cap E_j \cap E_k| - \dots$$

($|F|$ désigne le cardinal de F). Cette formule est très vite inutilisable. On va proposer des méthodes de Monte Carlo pour approximer de telles quantités. Par défaut, tous les tirages seront faits uniformément dans les ensembles concernés.

II.3.1 Premier cas

On est ici dans la situation où l'on peut simplement tirer au hasard des éléments dans E et tester à bas prix leur appartenance aux différents sous-ensembles. On fait ici finalement comme au § II.1.

Exemple. On se donne un système d'équations de la forme $Ax \leq b$, où A est une matrice $m \times p$, x est un vecteur de 0 ou 1 de dimension p , et b est un vecteur de dimension m . Cette équation signifie une inégalité pour chaque coordonnée. Le calcul du nombre de solutions x à A et b fixés est très difficile. On est ici dans la situation où

$$E = \{0, 1\}^p, \quad E_i = \{x \in E : \sum_j a_{ij} x_j \leq b_i\}$$

et l'on cherche $\theta = |\cap_i E_i|$.

Comme $\theta/|E|$ est la probabilité qu'un point de E tiré au hasard tombe dans $\cap_i E_i$, l'algorithme consiste à calculer empiriquement cette probabilité et à la multiplier par $|E|$:

11 - ALGORITHME

1. Tirer au hasard $e_1, \dots, e_n \in E$
2. $\hat{\theta} = |E| \cdot |\{j : e_j \in \cap_i E_i\}|/n$, $\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = (|E| - \hat{\theta})\hat{\theta}/n$.

La variance de $\hat{\theta}$ est $(|E| - \theta)\theta/n$.

II.3.2 Deuxième cas

On est ici dans la situation où l'on peut tirer au hasard des éléments dans chacun des E_i et où les $|E_i|$ sont connus. Karp et Luby¹ ont proposé un algorithme pour calculer $\theta = |\cup_{i=1}^K E_i|$ dans ces circonstances.

12 - ALGORITHME

1. Tirer au hasard $\alpha \in \{1, \dots, K\}$ avec probabilité $P(\alpha = i) = p_i = |E_i|/\sum |E_j|$
2. Tirer $\varepsilon \in E_\alpha$ et poser $\tau = 1/l(\varepsilon)$ où la fonction $l(e)$ est le nombre de i tels que $e \in E_i$.
3. Itérer N fois les deux points précédents. $\hat{\theta} = \bar{\tau} \sum |E_i|$ où $\bar{\tau}$ est la moyenne empirique de τ
4. $\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = N^{-1}(\sum |E_i|)^2 Var_{emp}(\tau)$ (Var_{emp} = variance empirique).

REMARQUE. On va voir que la variance est bornée par

$$Var(\hat{\theta}) \leq N^{-1}\theta \sum |E_i| \leq N^{-1}K\theta^2. \quad (\text{II.1})$$

Cette borne ne prend pas en compte le calcul de $l(\varepsilon)$. S'il est long, le nombre d'opération est plutôt d'ordre $n = NK$, d'où une variance en $K^2\theta^2/n$ qui peut encore être nettement inférieur à $(|E| - \theta)\theta/n$.

Démonstration: Il s'agit de vérifier que $E[\tau] = \theta/\sum |E_i|$. Il faut pour cela calculer la loi de $l(\varepsilon)$. Soit F_q l'ensemble des points qui appartiennent à exactement q des ensembles E_i :

$$F_q = \{e \in E : l(e) = q\}.$$

Le tirage successif de α et ε revient à tirer ε uniformément dans la réunion disjointe des E_i . Comme chaque point de F_q y est représenté q fois, on a

$$P(l(\varepsilon) = q) = P(\varepsilon \in F_q) = s^{-1}q|F_q|, \quad s = \sum |E_k|.$$

D'où le calcul de l'espérance de τ :

$$E[\tau] = \sum_q q^{-1}P(l(\varepsilon) = q) = s^{-1}|\cup F_q| = s^{-1}|\cup E_i|.$$

Démontrons maintenant (II.1). On a

$$Var(\hat{\theta}) = s^2 Var(\bar{\tau}) = N^{-1}s^2 Var(\tau) \leq N^{-1}s^2 E[\tau^2] = N^{-1}s^2 \sum_q q^{-2}s^{-1}q|F_q| \leq N^{-1}s\theta. \quad \blacksquare$$

Le point 2 de l'algorithme peut être remplacé par

- 2 bis. Tirer $\varepsilon \in E_\alpha$. Tirer au hasard des $\beta \in \{1, \dots, K\}$ (uniformément) jusqu'à ce que $\varepsilon \in E_\beta$, enregistrer le nombre $\nu \geq 1$ de ces tirages et faire $\tau = \nu/K$.

1. R.M. Karp, M. Luby, "Monte Carlo algorithms for enumeration and reliability problems," *24th Annual symposium on foundations of computer science*, New-York 1983.

On vérifie en effet que $E[\tau] = 1/l(\varepsilon)$. Les variances sont légèrement modifiées.

Exemple : formules booléennes. On se place dans $\{0, 1\}^d$. Chaque E_i est l'ensemble des suites de variables booléennes $b \in \{0, 1\}^d$ qui satisfont une formule conjonctive (des « et ») :

$$\prod_{j \in J_i} b_j = 1$$

soit encore en langage logique

$$\bigwedge_{j \in J_i} b_j = \text{vrai.}$$

E_i est donc simplement caractérisé par l'ensemble d'indices J_i où b doit valoir 1. L'ensemble $\cup E_i$ est une disjonction (des « ou ») de telles formules :

$$\bigvee_i \bigwedge_{j \in J_i} b_j = \text{vrai}$$

ce qui correspond à la « forme normale disjonctive » d'une formule booléenne.

Noter qu'il n'y a aucune difficulté à tirer un point au hasard dans E_i et que $|E_i| = 2^{d-|J_i|}$.

Extension au cas probabilisé. On vérifie sans peine que si l'on veut maintenant calculer $\theta = P_0(\cup E_i)$ pour une certaine mesure de probabilité P_0 l'algorithme devient :

13 - ALGORITHME

1. Tirer au hasard $\alpha \in \{1, \dots, K\}$ avec probabilité $P(\alpha = i) = p_i = P_0(E_i) / \sum P_0(E_j)$, puis tirer $\varepsilon \in E_\alpha$ avec probabilité $P(\varepsilon = e) = P_0(e) / P_0(E_\alpha)$
2. (Inchangé) Poser $\tau = 1/l(\varepsilon)$ (ou faire comme au 2 bis ci-dessus)
3. Itérer les deux points précédents. $\hat{\theta} = \bar{\tau} \sum P_0(E_i)$.

II.4 Exemples applicatifs simples

II.4.1 Temps d'échappement d'une comète du système solaire

Soit $-z < 0$ l'énergie d'une comète (l'énergie est négative, calculée de sorte qu'elle sera nulle une fois la comète sortie du système solaire). La durée d'une période de sa trajectoire est $z^{-3/2}$. On suppose que cette énergie varie aléatoirement selon un modèle où elle est considérée constante sur chaque période :

$$z_{i+1} = z_i + u_i.$$

Les u_i sont des gaussiennes centrées réduites indépendantes. Soit M le premier instant où $z_M = 0$, la durée de vie de cette comète est $T = \sum_{i=0}^{M-1} z_i^{-3/2}$. Des simulations de Monte Carlo² permettent d'étudier la distribution de T en fonction de z_0 (l'article original d'Hammersley considère les situations $z_0 = 1/2, 1, 2, 4, 8$).

II.4.2 Perte de connexion dans un graphe

On se donne un graphe totalement connecté (réseau de communication) pour lequel la probabilité de perte du i -ième arc est p_i . On veut savoir la probabilité p de coupure de connexion entre deux nœuds s et t (ou deux ensembles de nœuds).

La solution la plus simple est de répéter n fois l'expérience suivante (tirage d'un graphe aléatoire) :

2. J.M. Hammersley, D.C. Handscomb, *Monte Carlo Methods*, Chapman, Hall, 1964.

1. Tirer au hasard les pertes d'arc : pour chaque arc tirer une variable Bernoulli de probabilité p_i dont la valeur dira si l'arc est perdu.
2. Voir si la communication entre s et t est perdue.

et enfin de calculer la probabilité empirique \hat{p}_n de coupure de communication entre ces deux nœuds. La variance d'estimation est $p(1-p)/n$.

En pratique on essaiera de tester la perte de communication au fur et à mesure de la génération des arcs : par exemple si deux arcs partent de s , on peut les simuler en premier et s'ils sont perdus, rien ne sert de poursuivre la simulation du graphe. Pour des méthodes plus subtiles, voir [16].

Un article de Newman³ fait une revue assez générale sur les graphes et leurs applications en modélisation. Un autre exemple de graphe aléatoire sera considéré au § IV.4.1, et aux exercices IV.7.2.10 et IV.7.2.11.

II.4.3 Files d'attente

Une station service est ouverte h heures par jours. Il y a un seul pompiste et les clients font la queue pour se faire servir dès que leur tour arrive. Les inter-arrivées des clients sont des variables aléatoires exponentielles indépendantes de paramètre λ_a . Le temps de service d'un client suit une loi d'Erlang(2, λ_s) (somme de 2 exponentielles indépendantes de paramètre λ_s).

Les clients suivent la stratégie suivante à leur arrivée en fonction de la longueur l de la file d'attente

- rester faire la queue si $l < 5$
- partir si $l > 10$
- si $5 \leq l \leq 10$ il y a une probabilité $(11-l)/7$ que le client reste.

Un client achète pour P euros d'essence, où P suit une loi inverse gaussienne (cf exercice I.6.0.1).

Estimer le chiffre d'affaire moyen d'une journée, et le temps d'attente moyen d'un client.

Pour ne pas perdre de temps, s'il n'y a aucun client, le pompiste se lance dans une tâche annexe qui lui prend un temps exponentiel de paramètre λ_t à réaliser, qui rapporte une somme S de loi inverse gaussienne. Quel est maintenant le chiffre d'affaire moyen d'une journée?

II.4.4 Options américaines

On se donne le modèle suivant pour l'évolution de la valeur d'une action :

$$V_n = V_0 e^{\sum_{i=1}^n X_i}, \quad X_i \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2).$$

On achète au temps 0 une option, c'est-à-dire le droit d'acheter une action à un prix K fixé à l'avance et à une date inférieure à N (dans l'option européenne la date est obligatoirement N). On cherche alors la meilleure politique d'achat, en supposant que l'on revend immédiatement après l'achat : comment décider au vu du cours du moment le meilleur instant ν pour acheter ; bien entendu on n'achète que si $V_\nu > K$, et le bénéfice est donc de $(V_\nu - K)_+$. Mathématiquement, comme on ne peut prendre de décision que sur la base de l'information passée, ν est un temps d'arrêt, c'est-à-dire que l'évènement $\{\nu = n\}$ ne dépend que de l'information précédant n ; cet évènement est donc ici une fonction des variables V_1, \dots, V_n . On cherche donc à maximiser sur les stratégies (temps d'arrêts) ν le bénéfice moyen

$$E[(V_\nu - K)_+].$$

Une première stratégie consiste à prendre $\nu = N$. On montre que c'est la meilleure si $\mu + \sigma^2/2 > 0$.

3. M. E. Newman, "The Structure and Function of Complex Networks", *SIAM Review*, Vol 45, no 2, 167-256, 2003.

Si $\mu + \sigma^2/2 < 0$, c'est un problème très difficile. Une stratégie proposée [39] est d'acheter dès que le gain est supérieur à ce que l'on peut espérer avoir dans le futur, soit le premier instant n tel que

$$V_n - K \geq E[(V_{n+i} - K)_+ | V_n], \quad i = 1, \dots, N - n.$$

Le membre de gauche se calcule sans problème et l'on obtient que ν sera le premier instant n tel que

$$V_n - K \geq V_n \max_{1 \leq i \leq N-n} \left(e^{i(\mu + \sigma^2/2)} \Phi(\sigma\sqrt{i} + b_i) - K \Phi(b_i) \right), \quad b_i = \frac{i\mu - \log(K/V_n)}{\sigma\sqrt{i}}$$

où Φ est la fonction de répartition de la gaussienne.

Des simulations permettent de comparer différentes stratégies, sur des critères arbitraires (gain moyen, variance du gain...).

II.4.5 Calcul du niveau d'un test

On veut savoir si un échantillon de données X (suite de variables i.i.d, tableau de contingence...) suit une certaine distribution P_0 (hypothèse H_0). Pour cela on propose un test qui réfutera H_0 si $S(X) > \lambda$; S est une fonction dont on pense qu'elle reste raisonnablement petite sous P_0 , par exemple la vraisemblance changée de signe, une statistique de χ^2 ... Le niveau du test est la probabilité d'erreur de première espèce $P_0(S(X) > \lambda)$. Il peut être estimé facilement par simulation sous P_0 . On peut ainsi ajuster λ de sorte à avoir le niveau voulu (p.ex. $\alpha=1\%$) : tirer n réalisations de la loi P_0 (loi de l'échantillon X sous H_0), disons (Y_1, \dots, Y_n) , et λ sera la $(1 - \alpha).n$ -ième valeur observée des $S(Y_i)$ (rangés par ordre croissant); la «p-value» correspondant à X sera estimée comme la proportion de $S(Y_i)$ qui dépassent $S(X)$.

Un test non-paramétrique d'indépendance par bootstrap. Soit des vecteurs i.i.d. $X_i = (X_{i1}, \dots, X_{ip})$, $1 \leq i \leq n$. On veut tester si X_{11}, \dots, X_{1p} sont indépendants. L'échantillon X est donc une matrice représentant n réalisations i.i.d. de la même distribution sur \mathbb{R}^p . Ici H_0 n'est malheureusement pas simple.

On se donne une statistique de test $S(X)$, $X = (X_1, \dots, X_n)$. Par exemple $S(X)$ est une certaine combinaison des corrélations empiriques. Une méthode consiste à considérer $p-1$ permutations aléatoires $\sigma_1, \dots, \sigma_{p-1}$ indépendantes de $\{1, \dots, n\}$ puis $X_i^\sigma = (X_{i1}, X_{\sigma_1(i)2}, \dots, X_{\sigma_{p-1}(i)p})$ et à choisir $\lambda(X)$ tel que $P(S(X^\sigma) \geq \lambda(X) | X) \leq \alpha$, c'est-à-dire le plus petit λ tel que :

$$\frac{1}{(n!)^{p-1}} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{p-1}} 1_{S(X^\sigma) \geq \lambda} \leq \alpha.$$

Ceci peut être fait par simulation. Comme sous H_0 pour tout σ la loi de X est invariante par $X \rightarrow X^\sigma$, et comme $\lambda(X) = \lambda(X^\sigma)$, le test qui réfute l'indépendance si $S(X) \geq \lambda(X)$ sera de niveau α :

$$P(S(X) \geq \lambda(X)) = P(S(X) \geq \lambda(X^{\sigma^{-1}})) = P(S(X^\sigma) \geq \lambda(X)) \leq \alpha$$

La «p-value» correspondant à X sera estimée comme la proportion de $S(X^\sigma)$ qui dépassent $S(X)$. Besag⁴ applique cette méthode aux tables de contingence.

II.5 Exercices

Exercice II.5.1 On sait que E contient un ensemble E_- de volume V_- . On sait tester si un point appartient à E_- mais en revanche on n'est pas capable de tirer uniformément dans le complémentaire de E_- . On choisit donc d'estimer le volume de $E \setminus E_-$ par la méthode de base, pour en déduire ensuite le volume de E .

4. J. Besag, *Markov Chains Monte Carlo for Statistical Inference*, Center for Stat. and the Social Sciences, Working Paper 9 (2000), updated February 2002. www.csss.washington.edu/Papers.

À quelle condition cette méthode est-elle plus rapide que celle consistant à estimer le volume de E directement ? Proposer également une condition suffisante simple sur le volume de E .

Exercice II.5.2 On est dans la situation de l'exercice II.5.1 avec $E = \{x \in [0, 1]^d : 0, 1 \leq x_1 \leq 0, 9\}$. Comparer les performances de l'algorithme de base, de celui de l'exercice II.5.1, et de l'algorithme accéléré du cours. On explicitera comment on fait le tirage pour l'algorithme accéléré.

Exercice II.5.3 Comparer $\sigma(\hat{V}_n)$ et l'erreur relative $\sigma(\hat{V}_n)/V$.

Exercice II.5.4 On considère la méthode suivante pour calculer $\theta = \int_0^1 f(x) dx$:

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i), \quad \text{avec } X_i \sim \mathcal{U}\left(\left[\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n}\right]\right) \text{ indépendantes.}$$

On suppose que f est dérivable sur l'intervalle avec dérivée bornée.

1. Borner $\text{Var}(f(X_i))$ par un terme en n^{-2} (on utilisera le théorème de Rolle).
2. Montrer que l'erreur d'estimation est d'ordre $n^{-3/2}$.

Exercice II.5.5 (Programmation) Estimer la proportion de suites de $\{0, 1\}^{20}$ qui contiennent au moins une suite de quatre 1 consécutifs. On utilisera la méthode de Karp et Luby.

Exercice II.5.6 (Programmation) Tester la méthode d'intégration sur $f(x) = \prod_{i=1}^d \frac{k\pi}{2} \sin(k\pi x_i)$ avec par exemple $d = 8$ et différents k . On calculera par ailleurs la valeur exacte de l'intégrale et de $\sigma(\hat{\theta})$. Comparer $k = 1$ et $k = 2$.

III

RÉDUCTION DE VARIANCE

Les méthodes de Monte Carlo sont l'application de la simulation à l'estimation. À partir du principe de base généralement très simple (simuler et moyenner), les chercheurs ont imaginé de nombreuses techniques pour accélérer la vitesse de convergence, qui restera toutefois quasiment toujours en $1/\sqrt{n}$. Ces méthodes font l'objet de ce chapitre.

Notons que l'usage de ces méthodes représente souvent un surcoût en calcul qu'il faudrait prendre en compte dans l'étude des performances. Pour un algorithme donné, ce surcoût varie énormément d'une situation concrète à une autre, c'est pourquoi on ne prendra en compte essentiellement dans la suite que la diminution de variance d'estimation, ce qui n'est pas forcément très objectif.

III.1 Échantillonnage préférentiel (importance sampling)

C'est une méthode de calcul de $\theta = E[f(X)]$ qui consiste à tirer les variables selon une distribution erronée, et à compenser numériquement le résultat à posteriori.

Pour en donner une idée, revenons au calcul d'une intégrale sur $[0, 1]$. Si p est une densité > 0 sur $[0, 1]$, on peut écrire

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{p(x)}p(x)dx$$

ce qui suggère la possibilité d'un autre algorithme :

$$\hat{\theta}' = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(Y_i)}{p(Y_i)}$$

où les Y_i sont i.i.d sur $[0, 1]$ de loi $p(x)dx$. De manière plus générale on peut proposer :

14 - ALGORITHME

Estimation de $\theta = E[f(X)]$. p est une densité > 0 sur $\{f \neq 0\}$.

1. Tirer n points indépendants sur Y_i selon la loi avec densité p par rapport à la loi de X

2. $\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(Y_i)}{p(Y_i)}$

3. Variance estimée : $\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{f(Y_i)^2}{p(Y_i)^2} - \hat{\theta}^2 \right)$

Rappelons que si X a une densité $f_X(x)$ et Y une densité f_Y , alors $p = f_Y/f_X$.

15 - THÉORÈME

On suppose que la densité p est > 0 sur $\{f \neq 0\}$. $\hat{\theta}$ est non-biaisé avec pour variance :

$$nVar(\hat{\theta}) = E[f(X)^2 p(X)^{-1}] - E[f(X)]^2$$

Elle est minimale pour $p = p^*$, $p^*(y) = |f(y)|/E[|f(X)|]$ auquel cas elle vaut 0 si $f \geq 0$.

Démonstration: Pour toute fonction φ , on a : $E[\varphi(Y)] = E[\varphi(X)p(X)]$. Par conséquent

$$E[\hat{\theta}] = E\left[\frac{f(Y)}{p(Y)}\right] = E[f(X)] = \theta.$$

Pour la variance :

$$nVar(\hat{\theta}) = Var(f(Y)/p(Y)) = E[f(Y)^2/p(Y)^2] - \theta^2 = E[f(X)^2/p(X)] - \theta^2.$$

Pour trouver le meilleur p , il faut minimiser $E[f(X)^2/p(X)]$. Noter que si $p = p^*$ cette quantité vaut $E[|f(X)|]^2$ qui est la plus petite valeur possible car pour tout choix de p

$$E[|f(X)|]^2 = E\left[\frac{|f(X)|}{\sqrt{p(X)}}\sqrt{p(X)}\right]^2 \leq E\left[\frac{f(X)^2}{p(X)}\right]E[p(X)] = E[f(X)^2/p(X)]. \quad \blacksquare$$

Aspects pratiques. Cette méthode peut être très avantageuse en grande dimension si f est petite sur une bonne partie de l'espace. Comme p^* est inconnu (si $f \geq 0$, connaître p^* implique connaître θ), on ne pourra pas employer le meilleur algorithme, toutefois il sera bon d'essayer de s'en approcher, ce qui signifie de **tirer les points dans une région en quantité proportionnelle à la valeur de f** . Une méthode proposée consiste à approcher p^* dans une famille paramétrique p_β en cherchant en cours d'algorithme le β qui réalisera la distance minimale entre p_β et p^* (cette distance peut être estimée à l'aide des échantillons de Monte Carlo)¹.

Certains auteurs proposent l'estimateur $\check{\theta} = (\sum_{i=1}^n f(Y_i)p(Y_i)^{-1})/(\sum_{i=1}^n p(Y_i)^{-1}) = \hat{\theta}(f)/\hat{\theta}(1)$ qui est également consistant et possède l'avantage de donner 1 si $f = 1$. Un calcul de variance asymptotique donne une valeur $E[p(X)^{-1}(f(X) - \theta)^2]$ pour $nVar(\hat{\theta})$ ce qui n'est généralement pas très bon, surtout si p est proche de p^* . C'est donc une plutôt mauvaise idée.

Évènements rares. C'est l'exemple typique d'application de la méthode : on cherche à estimer $P(A)$ pour un évènement A de probabilité très faible. Si l'on utilise la méthode habituelle, il faudra tirer un très grand nombre d'échantillons pour tomber dans A de temps en temps. L'échantillonnage préférentiel conseille de tirer avec densité proche de $p^*(y) = 1_A/P(A)$, c'est-à-dire de la loi de X conditionnelle à $X \in A$.

On tirera donc selon une loi qui favorise A davantage, et dont la densité est > 0 sur A . Cette distribution essayera de ressembler à la loi conditionnelle sachant A .

EXEMPLE SIMPLE. Soit $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$, on cherche à calculer $P(|X - 5| < 1/2)$; on a

$$P(|X - 5| < 1/2) \simeq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{|Y_i - 5| < 1/2} e^{-Y_i^2/2 + (Y_i - m)^2/2\sigma^2}$$

où les Y_i ont été tirés $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$. Un bon choix des paramètres est $m = 4.6$ et $\sigma = 0.5$ (se vérifie expérimentalement en calculant $\hat{\sigma}(\hat{\theta})$ pour différentes valeurs des paramètres).

1. P-T. De Boer, D.P. Kroese, S. Mannor, R.Y. Rubinstein, "A Tutorial on the Cross-Entropy Method" (2003). Soumis à *Annals of Operation Research*. wwwhome.cs.utwente.nl/~ptdeboer/ce/tutorial.html.

EXEMPLE COMPLIQUÉ. Reprenons l'exemple du § II.4.3 et supposons que l'on cherche la probabilité d'avoir trois fois plus de clients servis que d'habitude sur une journée : $\theta = P(N_s \geq 3\mu)$ où $\mu = E[N_s]$. On suppose ici que le temps de service est également exponentiel. Il s'agit de deviner la loi des variables sachant que $N_s \geq 3\mu$. Plusieurs cas peuvent se présenter :

- On pense que le pompiste est sous-employé et qu'une grosse arrivée de clients suffit à expliquer le phénomène. Dans ce cas on pourra simuler les arrivées avec un taux trois fois supérieur et choisir l'estimateur

$$\hat{\theta} = \text{Moyenne empirique}(1_{N_s \geq 3\mu} 3^{-N_t} e^{\sum 2\lambda_a T_i})$$

où les T_i sont les inter-arrivées entre deux clients, N_s le nombre de clients servis dans la simulation, N_t le nombre total de clients apparus. Le facteur se trouve par le raisonnement suivant : on a simulé avec la densité $3\lambda_a e^{-3\lambda_a T_i}$ pour chaque inter-arrivée au lieu de $\lambda_a e^{-\lambda_a T_i}$, il faut donc compenser en multipliant par $e^{2\lambda_a T_i} / 3$.

Noter que θ est maintenant rendu petit par le terme $3^{-N_t} e^{\sum 2\lambda_a T_i} \sim 3^{-N_t} e^{2N_t/3}$.

Le choix de tripler le taux a été fait par simplicité, on aurait pu faire un autre choix de loi d'arrivée qui en gros triple le nombre de clients.

- On pense qu'au contraire les clients arrivent toujours en grand nombre et qu'un jour exceptionnel s'expliquera par de temps de services plus courts, auquel cas on simulera avec un taux trois fois supérieur puis

$$\hat{\theta} = \text{Moyenne empirique}(1_{N_s \geq 3\mu} 3^{-N_s} e^{\sum 2\lambda_s S_i})$$

où les S_i sont les temps de service.

- On pense que les deux effets interviennent et l'on combine les deux méthodes, par exemple en multipliant par trois les deux taux.

III.2 Variables de contrôle

Supposons que l'on cherche à calculer $\theta = E[f(X)]$ par simulations de X . Soit Y_i une v.a. a priori proche de $f(X_i)$ dont on connaît l'espérance (typiquement $Y_i = g(X_i)$ avec g proche de f), on a alors l'estimateur

$$\hat{\theta} = E[Y] + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - Y_i.$$

Il a une variance de

$$n \text{Var}(\hat{\theta}) = \text{Var}(f(X)) + \text{Var}(Y) - 2 \text{Cov}(f(X), Y)$$

et l'on y gagne si

$$\text{Cov}(f(X), Y) \geq \frac{1}{2} \text{Var}(Y).$$

Exemple : retranchement d'un estimateur intermédiaire. Ayant à notre disposition une famille paramétrique de fonctions g_β pour laquelle on sait calculer $E[g_\beta(X)]$, on peut de choisir pour g un bon approximant de f se trouvant dans cette famille (par exemple en estimant β).

Le cas non-paramétrique est similaire. Si f est régulière à support dans $[0, 1]^d$, l'estimation de $\int_{[0,1]^d} f(x)dx$ par $n^{-1} \sum f(X_i)$ peut sembler rustique. Une façon d'améliorer est de commencer par faire une estimation non paramétrique de f à l'aide de points Z_1, \dots, Z_p

$$g(x) = \frac{1}{ph^d} \sum_{i=1}^p f(Z_i) K\left(\frac{x - Z_i}{h}\right)$$

avec, si s est la régularité de f , une erreur d'approximation dans L_2 de $p^{-s/(2s+d)}$ pour h d'ordre $p^{-1/(2s+d)}$ (le choix effectif de h se fait empiriquement facilement car f est calculable sans erreur). Z et g sont désormais fixés. On estime alors l'intégrale de $f - g$ avec $n - p$ points et l'on obtient alors pour $\hat{\theta}$ une variance de

$$Var(\hat{\theta}) = (n - p)^{-1} p^{-2s/(2s+d)} O(1) = n^{-1-2s/(2s+d)} O(1)$$

si $p = n/2$. Les méthodes de quadrature donnent au mieux une erreur d'ordre $n^{-s/d}$ (à comparer donc à $n^{-1/2-s/(2s+d)}$). On n'a pas pris en compte ici le fait que le temps de calcul de $f(x)$ n'est pas forcément analogue au temps de calcul de $g(x)$.

III.3 Échantillonnage corrélé

On cherche à estimer la différence $\theta = \theta_2 - \theta_1$ deux paramètres $\theta_1 = E[f(X)]$ et $\theta_2 = E[g(Y)]$; c'est-à-dire la moyenne de deux fonctions sous deux distributions différentes. Souvent $f = g$ et les distributions sont proches. La méthode usuelle consiste à générer des X_i et des Y_i indépendants et à poser

$$\hat{\theta} = \hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - g(Y_i)$$

et l'on trouve

$$Var(\hat{\theta}) = Var(\hat{\theta}_1) + Var(\hat{\theta}_2) - 2Cov(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) = Var(\hat{\theta}_1) + Var(\hat{\theta}_2).$$

On aurait bien entendu un meilleur résultat si l'on arrivait à corrélérer positivement les deux estimateurs. Par exemple dans le cas extrême où X et Y ont même loi et $f = g$, le choix $\hat{\theta}_2 = \hat{\theta}_1$ conduirait à une variance nulle; on peut donc penser à juste titre que le gain peut être considérable.

Si l'on utilise la méthode d'inversion (cf § I.3.2), une possibilité est de générer X_i et Y_i à partir de la même variable uniforme : $X_i = Q_X(U_i)$ et $Y_i = Q_Y(U_i)$; il suffit alors que f et g soient croissantes l'une de l'autre (par exemple si $f = g$) pour réduire la variance (cf exercice III.8.10).

III.4 Variables antithétiques

Considérons deux estimateurs $\hat{\theta}_1$ et $\hat{\theta}_2$. Leur moyenne $\hat{\theta}_3$ est encore un estimateur dont la variance est

$$Var\left(\frac{\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2}{2}\right) = \frac{Var(\hat{\theta}_1)}{4} + \frac{Var(\hat{\theta}_2)}{4} + \frac{Cov(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)}{2}.$$

On voit que si ces deux estimateurs sont négativement corrélés, on fait mieux que s'ils étaient indépendants. On a par exemple

16 - THÉORÈME

Soient U_i des v.a.i.i.d $\mathcal{U}([0, 1])$ et φ une fonction monotone de chacune de ses variables, alors les variables

$$X = \frac{1}{2}(\varphi(U_1, \dots, U_n) + \varphi(U_{n+1}, \dots, U_{2n})) \quad Y = \frac{1}{2}(\varphi(U_1, \dots, U_n) + \varphi(1 - U_1, \dots, 1 - U_n))$$

vérifient $Var(Y) \leq Var(X)$.

Pour la démonstration voir l'exercice III.8.8. En particulier, si f une fonction monotone, alors les estimateurs

$$\hat{\theta}_i = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{2n} f(Q_X(U_i)), \quad \hat{\theta}_a = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n f(Q_X(U_i)) + f(Q_X(1 - U_i))$$

où Q_X est la fonction quantile de X du § I.3.2, vérifient $Var(\hat{\theta}_a) \leq Var(\hat{\theta}_i)$. Un exemple d'application est donné au § III.6 (calcul de π).

On peut aussi envisager cette méthode pour des situations plus compliquées lorsque les simulations utilisent la méthode d'inversion, comme par exemple la pompe à essence (cf § II.4.3) : l'estimateur prend la forme $\hat{\theta} = \varphi(U_1, \dots, U_n)$, où les variables U_i sont $\mathcal{U}([0, 1])$.

Rien ne garantit à coup sûr que $\hat{\theta}_a$ soit meilleur que $\hat{\theta}_i$ si φ n'est pas monotone; l'on peut toutefois estimer facilement la corrélation entre les deux termes et vérifier son signe. Plus précisément, si $\hat{\theta} = n^{-1} \sum f(X_i)$ et que X_i est fonction de p variables uniformes (U_1, \dots, U_p) , il s'agit de vérifier que la corrélation entre $f(X_i)$ et $f(\tilde{X}_i)$, où \tilde{X}_i est calculé avec $1 - U_1, \dots, 1 - U_p$, est bien négative.

III.5 Échantillonnage stratifié

Exemple introductif. Supposons que les clients de l'exemple du § II.4.3 arrivent avec des taux qui changent chaque jour. Il y a trois taux possibles $\lambda_{a1}, \lambda_{a2}, \lambda_{a3}$, qui sont aléatoires avec probabilités p_1, p_2, p_3 . On cherche toujours à calculer le chiffre d'affaire moyen sur une journée.

Le mode habituel de simulation consiste à répéter la procédure suivante : simuler d'abord le choix d'un des trois taux, puis simuler la journée.

L'option d'échantillonnage stratifié consiste à faire trois séries de simulations, une pour chaque taux, puis à faire la moyenne des trois résultats avec les poids p_1, p_2, p_3 .

Méthode. On cherche à calculer $\theta = E[f(X)]$ par simulations de X . On suppose que l'on est capable de séparer l'espace de probabilité Ω en J sous-ensembles disjoints Ω_j de probabilité connue :

$$P(\cup_j \Omega_j) = 1, \quad P(\Omega_j \cap \Omega_k) = 0, \quad j \neq k$$

et que l'on peut simuler sur chacun de ces ensembles avec la probabilité $P(\cdot|\Omega_j)$. Tout se base alors sur la formule

$$E[f(X)] = \sum_{j=1}^J P(\Omega_j) E[f(X)|\Omega_j].$$

17 - ALGORITHME

Estimation de $\theta = E[f(X)]$.

1. Simuler n_j points $(X_{1j}, \dots, X_{n_j j})$ dans chaque Ω_j avec probabilité $P(\cdot|\Omega_j)$
2. Estimateur :

$$\hat{\theta} = \sum_{j=1}^J \frac{P(\Omega_j)}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} f(X_{ij})$$

3. Variance estimée :

$$\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = \sum_{j=1}^J \frac{P(\Omega_j)^2 \hat{\sigma}_j^2}{n_j}, \quad \hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} f(X_{ij})^2 - \left(\frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} f(X_{ij}) \right)^2$$

La démonstration de la validité de la procédure est laissée en exercice. La variance de $\hat{\theta}$ est

$$\text{Var}(\hat{\theta}) = \sum_{j=1}^J \frac{P(\Omega_j)^2}{n_j} \sigma_j^2, \quad \sigma_j^2 = E[f(X)^2|\Omega_j] - E[f(X)|\Omega_j]^2.$$

Choix des Ω_j . Au vu de la formule précédente, on a intérêt à choisir ses Ω_j de sorte que f y ait la plus petite variance.

Choix des n_j . Si $n_j = nP(\Omega_j)$, on obtient toujours une réduction de variance d'un terme qui est la variance inter-classe (il ne reste que la variance intra-classe) :

$$n\text{Var}(\hat{\theta}) = \sum_{j=1}^J P(\Omega_j) \sigma_j^2 = \text{Var}(f(X)) - \sum_{j=1}^J P(\Omega_j) (E[f(X)|\Omega_j] - \theta)^2. \quad (\text{III.1})$$

Cependant le meilleur choix (sous la contrainte $\sum n_j = n$) est

$$n_j^* = nP(\Omega_j) \sigma_j / \sum_k P(\Omega_k) \sigma_k$$

avec une variance de

$$n\text{Var}(\hat{\theta}) = \left(\sum_{j=1}^J P(\Omega_j) \sigma_j \right)^2, \quad n_j = n_j^*.$$

On peut estimer également en cours d'algorithme les proportions idéales $\pi_j = n_j^*/n$:

$$\hat{\pi}_j^* = P(\Omega_j) \hat{\sigma}_j / \sum_k P(\Omega_k) \hat{\sigma}_k.$$

Choix de J . Éventuellement grand : on vérifie simplement que pour les deux choix de n_j proposés ci-dessus, la variance diminue à chaque fois que l'on scinde une classe Ω_j en deux. Rien n'interdit de prendre $J = n$.

Extension. Si l'on ne sait pas tirer aléatoirement dans les Ω_j mais que l'on sait tester si $x \in \Omega_j$, on peut alors tirer les X_i aléatoirement dans Ω et prendre ensuite l'estimateur $\hat{\theta}$, en distinguant a posteriori ceux qui sont tombés dans chaque ensemble. Noter que si l'on approxime dans cet estimateur $P(\Omega_j)$ par n_j/n , on retombe sur l'estimateur habituel !

III.6 Conditionnement

Exemple. Considérons la station essence du § II.4.3. Si l'on s'intéresse au chiffre d'affaire moyen sur une journée, la méthode de base consiste à simuler une réalisation P_k du prix payé pour chaque client, et à calculer la somme des P_k sur chaque journée simulée :

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{N_i} P_{ik}$$

où N_i est le nombre de client de la i -ième journée. La méthode avec conditionnement consiste à affecter la moyenne \bar{P} de P_k à chaque transaction :

$$\hat{\theta}' = \frac{\bar{P}}{n} \sum_{i=1}^n N_i.$$

Cas général. De manière générale lorsqu'on cherche à calculer $E[X]$, on simule des réalisations de X mais aussi d'autres variables annexes, Y, Z, \dots . Il arrive que l'on sache simplement calculer $E[X|Y] = g(Y)$, auquel cas l'estimateur

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum X_i, \quad \text{Var}(\hat{\theta}) = \frac{1}{n} \text{Var}(X)$$

peut être remplacé par

$$\hat{\theta}' = \frac{1}{n} \sum g(Y_i), \quad \text{Var}(\hat{\theta}') = \frac{1}{n} \text{Var}(E[X|Y]).$$

La variance d'estimation a diminué. Dans l'exemple précédent, Y est le nombre N de transactions de la journée, et $E[\sum_{k=1}^N P_k | N] = N\bar{P}$.

Exemple : calcul de π . Pour calculer π on tire des v.a. dans $[0, 1]^2$ et l'on compte la proportion de points qui sont tombés dans le cercle centré en 0 de rayon 1 ; ici $\theta = \pi/4$:

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \quad X_i = 1_{U_i^2 + V_i^2 < 1}, \quad U_i, V_i \sim \mathcal{U}([0, 1]).$$

La variance de $\hat{\theta}$ est $\theta(1 - \theta)/n = 0,17/n$. On a aussi

$$E[X|U = u] = P(u^2 + V^2 < 1) = P(V < \sqrt{1 - u^2}) = \sqrt{1 - u^2}.$$

D'où l'estimateur

$$\hat{\theta}' = \frac{1}{n} \sum_i \sqrt{1 - U_i^2}.$$

La variance est très simple à calculer et vaut, au facteur n près, $2/3 - (\pi/4)^2 \simeq 0.05$. On peut encore améliorer en utilisant les variables antithétiques :

$$\hat{\theta}'' = \frac{1}{2n} \sum_i \sqrt{1 - U_i^2} + \sqrt{1 - (1 - U_i)^2}.$$

On trouve cette fois-ci par intégration numérique une variance de $0,007/n$.

Comparaison avec l'échantillonnage stratifié. Dans la formule

$$E[f(X)] = \int f(x) p_{X|Y=y}(dx) p_Y(dy)$$

l'échantillonnage stratifié calcule l'intégrale en x par simulation et l'intégrale (discrète) en y explicitement tandis que la méthode de conditionnement fait exactement le contraire.

III.7 Quasi-Monte Carlo : les suites à discrédance faible

Il s'agit de trouver des suites qui permettent une vitesse de convergence plus rapide que les suites aléatoires pour le problème de l'intégration. Il est facile de voir que si l'on veut par exemple intégrer sur $[0, 1]$ une fonction f périodique de période 1 et de régularité donnée sur \mathbb{R} , alors pour des raisons de symétrie, on ne pourra faire mieux (en l'absence d'autre hypothèse sur f) que d'utiliser une suite exactement uniformément répartie ($X_k = k/n$, $k = 1, \dots, n$) ; dans le cas non périodique il faut faire appel à des méthodes plus subtiles (trapèzes...). Cette méthode a deux défauts : la fonction doit être périodique et pour passer d'une suite de longueur n à une suite de longueur $n + 1$, il faut recalculer tous les points. Les suites à discrédance faible sont des suites déterministes qui évitent ces défauts.

18 - DÉFINITION

Soit $(\xi_i)_{i>0}$ une suite de points de $[0, 1]^d$; pour tout ensemble $B \subset [0, 1]^d$, on désigne par $\lambda_n(B)$ la proportion des n premiers points de cette suite appartenant à B . La discrédance est la suite :

$$D_n(\xi) = \sup_B |\lambda_n(B) - \lambda(B)|, \quad \lambda_n(B) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_B(\xi_i)$$

où λ est la mesure de Lebesgue et le sup est pris tous les B de la forme $B = \prod_{i=1}^d [0, u_i]$, $u_j \leq 1$.

La discrédance compare donc la fonction de répartition empirique à celle de la mesure de Lebesgue. Il existe d'autres mesures de discrédance dont on ne parlera pas ici.

La variation totale de f au sens de Hardy et Krause est

$$V(f) = \sum_{k=1}^d \sum_{i_1 < i_2, \dots, i_k} \int_{[0,1]^k} \left| \frac{\partial^k f}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_k}} \right| dx_{i_1} \dots dx_{i_k}$$

où f est calculée en $x_j = 1$ pour les j différents de i_1, \dots, i_k . On a le théorème

19 - THÉORÈME (INÉGALITÉ DE KOKSMA-HLAWKA)

Pour toute fonction f :

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\xi_i) - \int_{[0,1]^d} f(u) du \right| \leq V(f) D_n(\xi).$$

Il s'agit maintenant de trouver des suites ξ telles que $D_n(\xi)$ décroisse le plus vite possible. Il a été démontré qu'au mieux $D_n(\xi) = O(n^{-1} \log(n)^{d/2})$ pour $d > 1$ et $O(n^{-1} \log(n))$ pour $d = 1$. On sait par ailleurs fabriquer par des procédés arithmétiques des suites telles que (suites de Halton, de Faure, de Sobol, de Niederreiter...)

$$D_n(\xi) = O(n^{-1} \log(n)^d).$$

Une telle suite est appelée suite à discrédance faible; la suite $\xi_k = (kz_1, \dots, kz_d) \pmod{1}$, où les z_i sont des irrationnels indépendants sur \mathbb{Q} , satisfait $D_n(\xi) = O(n^{-1} \log(n)^{d+1+\varepsilon})$ pour tout $\varepsilon > 0$ [34].

La convergence est donc plus rapide qu'avec le Monte Carlo ordinaire, au moins pour des fonctions f telles que $V(f) < \infty$. Le problème principal est que la borne $V(f)D_n(\xi)$ est rarement très bonne, et difficile à calculer. Pour estimer l'erreur, l'idée suivante² est de coupler les deux méthodes :

20 - ALGORITHME (Répétitions)

1. Tirer R variables aléatoires uniformes X_r sur $[0, 1]^d$
2. $\hat{\theta}_r = n^{-1} \sum_{i=1}^n f(X_r + \xi_i)$, $\hat{\theta} = R^{-1} \sum_{r=1}^R \hat{\theta}_r$,
3. $\hat{\sigma}^2(\hat{\theta}) = R^{-2} \sum_{r=1}^R (\hat{\theta}_r - \hat{\theta})^2$

En effet les $\hat{\theta}_r$ sont i.i.d et $Var(\hat{\theta}) = R^{-1} Var(\hat{\theta}_1)$. On voit en particulier que l'estimation de $\sigma(\hat{\theta})$ est raisonnable, même avec des R modestes. Notons que son ordre de grandeur théorique est au plus $R^{-1/2} n^{-1} \log(n)^d$.

2. R. Cranley, T.N.L. Patterson, "Randomization of number theoretic methods for multiple integration", *SIAM J. Num. Anal.*, 13(6), 904-914, 1976.

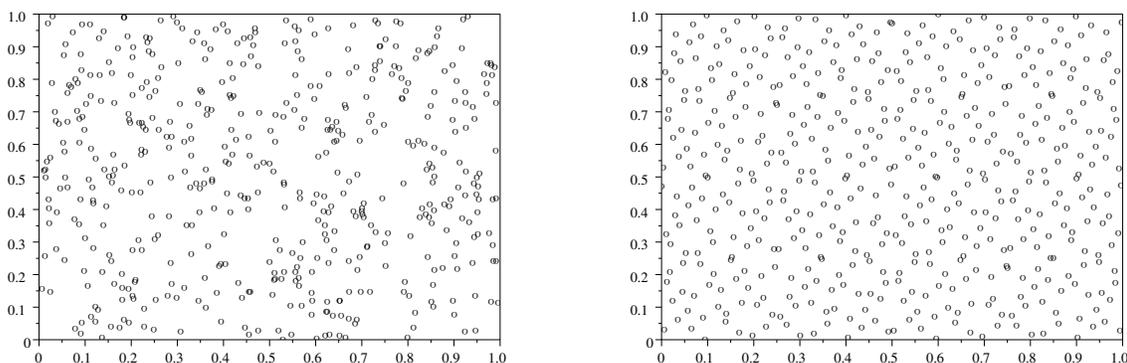


FIGURE III.1 – Une suite aléatoire et une suite à discrédance faible sur $[0, 1]^2$ (500 points).

Attention, la suite de vecteurs $((\xi_1, \xi_2), (\xi_3, \xi_4), \dots)$ n'est pas à discrédance faible. Contrairement aux suites i.i.d, les suites à discrédance faible sous-échantillonnées ne sont plus à discrédance faible.

De manière plus générale, rien n'interdit de remplacer les suites aléatoires par des suites à discrédance faible dans une simulation qui n'utilise que des $\mathcal{U}([0, 1])$. Mais il faut bien **prendre garde** à rester dans le contexte du théorème (d devra être le nombre maximum de points nécessaires à construire un X_i , ce qui dans les cas de la station service du § II.4.3 ferait un vecteur par jour !).

Pour des compléments concernant ce paragraphe nous renvoyons [34] et [27]. Les suites à discrédance faible ne tirent généralement pas profit de la régularité de la fonction à intégrer (contrairement aux méthodes de quadrature) à l'exception des « lattice rules » dans le cas où la fonction est périodique, cf [34] § 5.1-5.2.

Des programmes pour les suites de Niederreiter, Faure et Sobol sont disponibles à l'adresse www.netlib.no/netlib/toms, numéros 738, 647 et 659.

III.8 Exercices

Exercice III.8.1 Motiver et proposer une méthode d'échantillonnage préférentiel pour l'exemple du § II.4.2 dans le cas où la probabilité de coupure est très faible (les p_i sont petits et les arcs nombreux).

Exercice III.8.2 Soit E une variable exponentielle, $X = \cos(E) + E$, et $Y = \cos(E) + E^2$.

1. Quelle est la loi de E sachant $E > A$?
2. Proposer une méthode d'échantillonnage préférentiel pour calculer $P(X > B)$ avec B grand (ne pas oublier la condition « $p > 0$ sur $\{f \neq 0\}$ »).
3. Adapter la méthode précédente au calcul $P(Y > B)$.

Exercice III.8.3 On veut estimer $P(X+Y > 3)$ où X et Y sont exponentielles indépendantes de paramètres λ et μ . Proposer une méthode de variables antithétiques, puis une méthode qui combine le conditionnement et les variables antithétiques.

Exercice III.8.4 On considère la méthode de variables de contrôle avec une fonction de contrôle g et un paramètre α : $\hat{\theta} = \alpha E[g(X)] + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - \alpha g(X_i)$.

Exprimer la variance de $\hat{\theta}$. Pour quelle valeur de α est-elle minimale ? De quel facteur a-t-elle diminué ?

Exercice III.8.5 Soit $(X_i)_{1 \leq i \leq 2n}$ une suite i.i.d. et les deux estimateurs

$$\hat{\theta}_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - g(X_i), \quad \hat{\theta}_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - \frac{1}{n} \sum_{i=n+1}^{2n} g(X_i).$$

À quelle condition sur f et g la variance de θ_1 est-elle inférieure à celle de θ_2 ?

Exercice III.8.6 On cherche la probabilité qu'une variable exponentielle de paramètre λ soit supérieure à A . On propose un échantillonnage préférentiel en tirant les n variables selon une loi de paramètre μ différent.

Étudier la variance de l'estimateur obtenu : On s'intéressera à l'asymptotique lorsque $A \rightarrow +\infty$ et l'on estimera la variance relative $Var(\hat{\theta})/\theta^2$ dans les deux situations « échantillonnage normal » et « échantillonnage préférentiel avec μ optimal » ; on donnera également, dans ces deux cas, l'ordre de grandeur du n nécessaire à l'obtention d'une estimée raisonnablement précise.

***Exercice III.8.7 (Importance splitting³)** On cherche à calculer la probabilité d'un évènement A assez rare, pour un processus long à simuler (probabilité de blocage dans un réseau téléphonique sur $[0, T]$...). L'idée est la suivante : lorsqu'au cours d'une simulation on est proche du blocage (charge du réseau supérieure à un seuil...), on fait repartir de cette situation plusieurs simulations indépendantes, afin d'augmenter ses chances d'observer A ; si l'on s'approche encore (charge supérieure à un nouveau seuil), on multiplie à nouveau les simulations... Le problème est que bien entendu, si l'on observe A plus souvent, les simulations en revanche ne sont plus tirées selon la même loi, et ne sont plus indépendantes.

Le cadre théorique adéquat est le suivant. Soit une suite d'évènements $B_i, i = 1 \dots k$ (« dépassement du i -ième seuil ») $A = B_{k+1} \subset B_k \dots \subset B_1$ et une suite de tribus $(\mathcal{F}_i)_{1 \leq i \leq k}$ telles que $B_i \in \mathcal{F}_i$ (dans l'exemple \mathcal{F}_i est la tribu du passé avant B_i). On part de N_0 simulations indépendantes. Si pour une simulation B_1 est atteint, on multiplie les simulations en faisant N_1 (choisi à l'avance) tirages conditionnellement à \mathcal{F}_1 , puis on fait de même avec B_2, \dots multipliant ainsi les simulations à partir du contingent de départ.

Montrer que pour toute v.a. intégrable $X(\omega)$ un estimateur sans biais de $E[X1_A]$ est

$$\frac{1}{N_0 N_1 \dots N_k} \sum X(\omega_i) 1_A(\omega_i) \tag{III.2}$$

où la dernière somme comptabilise tous les succès observés (indication : noter qu'on peut également multiplier les simulations si B_i n'est pas atteint ; bien voir le rôle de l'hypothèse de l'emboîtement des B_i et de l'appartenance aux tribus).

AUTRE POINT DE VUE. Supposons pour simplifier que $X = 1$. Soit ν_i le nombre de trajectoires vivantes à la i -ième étape, alors

$$\frac{\nu_{i+1}}{N_i \nu_i} \sim E[P(B_{i+1} | \mathcal{F}_i) 1_{B_i}] = P(B_{i+1} | B_i)$$

et l'on retrouve l'estimée en écrivant

$$P(A) = P(A | B_k) P(B_k | B_{k-1}) \dots P(B_2 | B_1) P(B_1) \tag{III.3}$$

Noter que $N_0 N_1 \dots N_k$ est bien plus grand que le nombre de simulations effectivement réalisées ; son inverse est le pendant du terme $3^{-N_i} e^{\sum 2\lambda_a T_i}$ de l'exemple du § III.1.

3. On pourra consulter les articles suivants :
A. Lagnoux, "Rare event simulation", à paraître dans PEIS. www.lsp.ups-tlse.fr/Fp/Lagnoux.
F. Cérou, A. Guyader, "Adaptive multilevel splitting for rare event analysis", rapport Inria 5710, octobre 2005. www.inria.fr/rrrt/liste-2005.html.

MISE EN ŒUVRE. Posons $p = P(A)^{1/k}$. Des calculs de variance (article d'A. Lagnoux cité en note) montrent qu'à k fixé on a intérêt à choisir les B_i de sorte que $P(B_{i+1}|B_i) = p$ et $N_i = 1/p$ pour $i = 1, \dots, k$ (si bien qu'en particulier le nombre d'échantillons en vie reste en moyenne constant).

Exercice III.8.8 Démontrer le théorème 16 à l'aide du théorème suivant :

21 - THÉORÈME

Soient $\varphi(x)$ et $\psi(x)$ deux fonctions de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R} , monotones l'une de l'autre séparément pour chacune de leurs variables au sens où pour tous x et y ne différant que par une seule composante :

$$(\varphi(y) - \varphi(x))(\psi(y) - \psi(x)) \geq 0$$

et soit X une v.a. sur \mathbb{R}^d à composantes **indépendantes**, alors

$$Cov(\varphi(X), \psi(X)) \geq 0.$$

REMARQUE : Pour la démonstration de ce théorème, faire d'abord le cas $d = 1$ en prenant l'espérance dans $(\varphi(Y) - \varphi(X))(\psi(Y) - \psi(X)) \geq 0$ où X et Y sont indépendantes de même loi, puis étendre par récurrence aux dimensions supérieures.

Exercice III.8.9 Démontrer la formule (III.1).

Exercice III.8.10 Montrer à l'aide du théorème 21 que si f et g sont croissantes l'une de l'autre (c.-à-d. $(f(y) - f(x))(g(y) - g(x)) \geq 0$), l'estimateur par échantillonnage corrélé

$$\hat{\theta} = \hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - g(Y_i), \quad X_i = Q_X(U_i), \quad Y_i = Q_Y(U_i)$$

a une moindre variance que l'estimateur à échantillonnage indépendant.

Exercice III.8.11 Réinterpréter l'exercice II.5.4 en fonction de ce qui a été vu dans ce chapitre.

Exercice III.8.12 (Programmation) Reprendre l'exercice II.5.6 avec une suite à discrétion faible.

IV

LES ÉCHANTILLONNEURS DE METROPOLIS ET DE GIBBS

Les échantillonneurs de Metropolis et de Gibbs sont deux méthodes pour simuler une distribution π sur un ensemble de cardinal ou de **dimension élevée**, pouvant être **multimodale**; elles consistent à simuler une chaîne de Markov dont la mesure invariante est π . L'exemple typique est $\pi(x) \propto \exp(V(x))$ où V est connue mais la constante de normalisation ne l'est pas; des exemples sont donnés au § IV.4. L'inconvénient de ces méthodes est que d'une part on ne simule plus des variables indépendantes et que d'autre part les variables n'ont pas la loi désirée dès le début car il faut attendre la convergence vers la mesure invariante. Ce deux problèmes seront étudiés au chapitre VI.

Les démonstrations ne seront faites que dans le cas d'un espace d'états fini.

IV.1 Rappels sur les chaînes de Markov à nombre fini d'états

On considère ici une chaîne de Markov X_n sur un ensemble fini E , et l'on note $P = (p_{ij})$ sa matrice probabilités de transition (attention P désigne également la probabilité des événements).

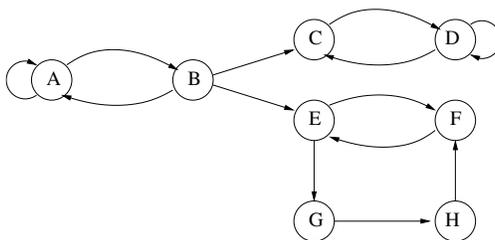


FIGURE IV.1 – Une chaîne à 8 états. On marque d'une flèche les transitions de probabilité non-nulle. A et B sont transients et il y a deux classes d'irréductibilité $\{C, D\}$ et $\{E, F, G, H\}$. La partition $\{E, F, G, H\} = \{E, H\} \cup \{F, G\}$ montre que cette classe est périodique; si $X_0 \in \{E, H\}$, alors $X_{2n} \in \{E, H\}$ pour tout n . Si l'on retire C et D la chaîne devient indécomposable, et irréductible si l'on retire également A et B .

CLASSIFICATION DES ÉTATS. Rappelons qu'on note $i \rightsquigarrow j$, s'il existe une suite de transitions de probabilité non nulle menant de i à j , et $i \rightsquigarrow\rightsquigarrow j$ si $i \rightsquigarrow j$ et $j \rightsquigarrow i$. Un état i tel que pour un j on ait $i \rightsquigarrow j$ et pas $j \rightsquigarrow i$ est dit transient; les autres sont récurrents. La relation de communication partitionne l'ensemble des

états récurrents en classes d'équivalence appelées classes d'irréductibilité (figure IV.1). Partant d'un état la chaîne arrive avec probabilité 1 dans une classe d'irréductibilité, en visite chaque état infiniment souvent, et plus jamais les autres états.

Une classe d'irréductibilité est dite périodique si elle admet une partition fixe non triviale dont chaque ensemble est visité successivement dans le même ordre avec probabilité un (si X_0 appartient à cet ensemble). En absence de classe périodique on dit que la chaîne est *apériodique*. En présence d'une seule classe d'irréductibilité on dit que la chaîne est *indécomposable*, et *irréductible* s'il y a pas d'état transient. On considère souvent que l'état initial appartient à une classe d'irréductibilité connue auquel cas il suffit de restreindre la chaîne à cette classe pour se ramener à une chaîne irréductible.

MATRICE DE TRANSITION ET CALCUL DE LOIS. Pour toute probabilité initiale μ (vecteur ligne), μP^n représente la loi de X_n si $X_0 \sim \mu$, et pour tous n, i, j et toute fonction f sur E représentée par un vecteur colonne :

$$(P^n)_{ij} = P(X_n = j | X_0 = i), \quad (P^n f)_i = E[f(X_n) | X_0 = i], \quad \mu P^n f = E_\mu[f(X_n)].$$

22 - THÉORÈME

P a toutes ses valeurs propres de module inférieur à 1 et 1 est toujours valeur propre de P . La chaîne est apériodique si et seulement si 1 est la seule valeur propre de module 1 de P , et indécomposable si et seulement si l'ordre de multiplicité de 1 est 1.

P est indécomposable si et seulement s'il existe un point i qui peut être atteint de tout autre par une suite de transitions non-nulles

$$\exists i \in E, \forall j \in E, \max_{n > 0} P(X_n = i | X_0 = j) > 0.$$

Une chaîne indécomposable est apériodique si et seulement si pour un i récurrent et un $n \geq 0$

$$P(X_n = i | X_0 = i) > 0, \quad \text{et} \quad P(X_{n+1} = i | X_0 = i) > 0.$$

Il existe toujours une mesure invariante π , $\pi P = \pi$; si P est indécomposable, elle est unique et pour toute fonction g

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_k) \longrightarrow \pi(g) = \sum_i \pi_i g(i) \quad \text{avec probabilité 1}$$

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \left(\sum_{k=1}^n g(X_k) - \pi(g) \right) \longrightarrow N(0, \sigma^2) \quad \text{en loi}$$

où σ dépend de g .

Si de plus P est apériodique, alors X_n converge en loi vers son unique mesure invariante $\pi = (\pi_i)_{i \in E}$ et il y a convergence à vitesse géométrique de P^n vers la matrice Π dont toutes les lignes sont égales à π : soit λ_2 la deuxième valeur propre de P et r son ordre de multiplicité algébrique, il existe un C tel que

$$\|P^n - \Pi\| \leq C n^{r-1} |\lambda_2|^n. \tag{IV.1}$$

Introduisons les chaînes réversibles, qui joueront un rôle important dans la suite :

23 - DÉFINITION

P est dite réversible¹ (ou f -réversible) s'il existe une fonction $f_i \geq 0$ non identiquement nulle telle que pour tous i et j

$$f_i p_{ij} = f_j p_{ji}.$$

24 - THÉORÈME

Si P est réversible, alors la mesure

$$\pi_i = \frac{f_i}{\sum_{j \in E} f_j}$$

est invariante. Si de plus $f > 0$ et P est indécomposable et apériodique, alors P est diagonalisable, et le théorème 22 s'applique avec $r = 1$.

Démonstration: L'identification de π est immédiate. La propriété de réversibilité implique que $DP = P^T D$ où D est la diagonale des f_i , ce qui signifie que la matrice $D^{1/2} P D^{-1/2}$ est symétrique; elle est diagonalisable, P aussi, et donc $r = 1$. ■

IV.2 L'échantillonneur de Gibbs

Soit $X = (X_1, \dots, X_d)$ un vecteur aléatoire de probabilité $\pi(X)$ que l'on veut simuler. On reste, pour simplifier dans le cas où X prend un nombre fini de valeurs bien que ce ne soit pas nécessaire. L'échantillonneur de Gibbs consiste à créer directement une chaîne de Markov réversible indécomposable apériodique de mesure invariante π en tirant chaque coordonnée à son tour selon sa loi conditionnelle aux autres. On notera $X^{k,x} = (X_1, \dots, X_{k-1}, x, X_{k+1}, \dots, X_d)$. Attention, ici l'indice k dans X_k n'est pas un indice temporel de chaîne de Markov mais l'indice de coordonnée.

25 - ALGORITHME

Tirage de X' (échantillon suivant) après X

1. Tirer k uniformément dans $\{1, \dots, d\}$
2. Tirer x selon la loi de X_k conditionnelle aux autres :

$$Q_k(x|X) = \pi(X_k = x | X_j, j \neq k) = \frac{\pi(X^{k,x})}{\sum_y \pi(X^{k,y})}$$

puis $X' = X^{k,x}$.

La chaîne est réversible avec $f = \pi$ puisque pour $X \neq X'$ et $p_{XX'} \neq 0$ on a $p_{XX'} = d^{-1} Q_k(x|X) = d^{-1} \pi(X') / q_X$ où $q_X = q_{X'}$. L'apériodicité vient de ce que $X' = X$ avec probabilité > 0 . L'indécomposabilité, qui se vérifie en général facilement au cas par cas, entraîne alors la convergence.

Variantes. Dans le premier point, on peut remplacer la loi uniforme par toute loi qui porte tous les points, ou encore faire un balayage déterministe de tous les points, c.-à-d. qu'à la n -ième étape $k = n \pmod{d}$ ².

2. Une piste pour montrer la convergence en loi dans ce dernier cas est d'observer que chaque opérateur de transition Q_k agit comme une projection orthogonale dans $L_2(\pi)$; le théorème de von Neuman sur les projections alternées est alors un outil très pratique pour conclure (communication privée d'Arnaud Guyader).

Pour les projections alternées, voir A. NETYANUN AND D.C. SOLMON, "Iterated Products of Projections in Hilbert Space", *Am. Math. Month.*, Vol. 113, No. 7 (Aug.-Sep., 2006), pp. 644-648.

Il ne faut en revanche pas rafraîchir tous les points simultanément (générer X'_1, \dots, X'_d à partir de (X_1, \dots, X_d) , et considérer (X'_1, \dots, X'_d) comme nouvel échantillon) car on fabrique alors une chaîne dont la loi invariante n'est plus la même³.

Cas continu. Même procédé : on tire X_k sous sa loi conditionnelle aux autres.

Avertissement. L'échantillonneur de Gibbs fonctionne d'autant mieux que les coordonnées sont peu dépendantes ; dans le cas contraire, la convergence vers la mesure invariante peut être très lente car la dépendance forte entre coordonnées nuit à la dynamique de la chaîne.

Exemple : formes produit. Dans cet exemple, X_k sera le nombre de communications téléphoniques en cours dans la k -ième cellule du réseau UMTS. Si N est le nombre de canaux (fréquences) disponibles, une contrainte nécessaire de non-interférence sera

$$\sum_{k \in \mathcal{C}} X_k \leq N$$

pour tout ensemble \mathcal{C} de cellules voisines. On suppose que sous ces contraintes l'opérateur sait attribuer des fréquences sans interférences. On notera E_0 l'ensemble des suites (x_1, \dots, x_d) qui satisfont ces contraintes. On suppose que la loi de (X_1, \dots, X_d) a la forme, dite forme produit (cf exercice IV.7.1.6 pour une justification)

$$\pi(x_1, \dots, x_d) = C \pi_1(x_1) \dots \pi_d(x_d) 1_{x \in E_0} \quad (\text{IV.2})$$

où chaque π_k est une mesure de probabilité (c'est l'indépendance conditionnée à E_0). On a ici

$$\pi(X_k = x | X_j, j \neq k) = \frac{\pi_k(x)}{\sum_y \pi_k(y)} 1_{X^{k,x} \in E_0}$$

où la somme est étendue aux y tels que $X^{k,y} \in E_0$. La simulation par échantillonneur de Gibbs est donc très simple (avec éventuellement une méthode de rejet pour tirer selon la loi conditionnelle). Si par exemple $\pi_k(0) > 0$ pour tout k , on a l'indécomposabilité puisque l'état nul peut être atteint en d transitions.

IV.3 Algorithme de Metropolis

Soit un ensemble discret E et une fonction f de E dans \mathbb{R}_+ . On veut générer des variables de distribution

$$\pi_i = C f_i$$

où C est la constante de normalisation. La difficulté que l'on rencontre est qu'en général, soit C n'est pas calculable car E est trop grand, soit E est un sous-ensemble difficilement atteignable d'un ensemble connu, par exemple si π est la mesure uniforme sur l'ensemble des coloriages des départements, avec 5 couleurs, tels que deux départements voisins soient de couleur *différente*. L'algorithme de Metropolis donne une méthode pour simuler une chaîne de Markov de mesure invariante π .

IV.3.1 Principes

Il s'agit donc de simuler $\pi_i = f_i / \sum_k f_k$ où les f_i sont connus. Il faut se donner une matrice p_{ij} telle que :

(MP) *Tous points i, j tels que $f_i, f_j > 0$ peuvent être joints par une chaîne $k_1 = i, k_2, \dots, k_{n-1}, k_n = j$ telle que $p_{k_l k_{l+1}} > 0, p_{k_{l+1} k_l} > 0$ et $f_{k_l} > 0$.*

Ou un exposé plus approfondi : H.H. BAUSCHKE, J.M. BORWEIN "Dykstra's Alternating Projection Algorithm for Two Sets", *J. Appr. Th.*, Vol. 79, 3, Dec. 1994, pp. 418-443.

3. Considérer la distribution sur $\{0, 1\}^2$ qui attribue à $(x, y) \neq (1, 1)$ la probabilité $1/3$ et $P((1, 1)) = 0$. Partant de $(0, 0)$, le rafraîchissement simultané conduit à $(1, 1)$ avec probabilité $1/4$.

Ce qu'on pourrait résumer par «irréductibilité aller-retour sur $\{f > 0\}$ ». C'est le cas si $f > 0$ et P est indécomposable avec $p_{ij} = 0$ ssi $p_{ji} = 0$.

26 - ALGORITHME Tirage de X_n après $X_{n-1} = i$

1. Tirer j dans E avec probabilité p_{ij}
2. Faire aléatoirement $X_n = j$ ou $X_n = i$ avec probabilité q et $1 - q$:

$$q = \min\left(1, \frac{f_j p_{ji}}{f_i p_{ij}}\right). \quad (\text{IV.3})$$

Remarque : Pour que π soit invariante, il est essentiel de garder tous les échantillons, répétitions comprises.

27 - THÉORÈME

On se place sous (MP) et l'on suppose de plus que $f_{X_0} > 0$, et que P n'est pas f -réversible ou est apériodique. Alors la suite X_n produite par l'algorithme converge en loi vers π et le théorème 22 s'applique. De plus la chaîne est réversible.

Démonstration: Posons $E_0 = \{f \neq 0\}$. Comme $X_0 \in E_0$, la forme de q implique que $X_n \in E_0$ pour tout n . La matrice de transition de la chaîne (X_n) est

$$\check{p}_{ij} = \min\left(p_{ij}, \frac{f_j p_{ji}}{f_i}\right), \quad i \neq j, \quad \check{p}_{ii} = 1 - \sum_{k \neq i} \check{p}_{ik}$$

et en particulier $f_i \check{p}_{ij} = f_j \check{p}_{ji}$; il y a donc réversibilité et π est bien invariante. L'indécomposabilité est conséquence de (MP). Pour montrer l'apériodicité, noter que s'il existe $i \in E_0$ tel que $\check{p}_{ii} \neq 0$ alors il y a apériodicité en raison du théorème 22; sinon $\check{p}_{ij} = p_{ij}$ pour tout $i \in E_0$ et P est f -réversible, et donc apériodique par hypothèse. ■

Cas continu. Il faut raisonner avec les densités. Prenons le cas d'une loi de densité $\pi(x) = Cf(x)$ par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . On tirera un nouvel état selon une loi de densité $p_x(y)$ et $q = \min\left(1, \frac{f(y)p_y(x)}{f(x)p_x(y)}\right)$. Si $p_x(y)$ consiste à choisir un indice k au hasard et à remplacer y_k par une valeur aléatoire y'_k de loi $p(\xi)$, alors $q = \min\left(1, \frac{f(y)p(x_k)}{f(x)p(y'_k)}\right)$.

Choix de p . En pratique E est un ensemble très grand (beaucoup de points ou grande dimension), et la difficulté est de trouver un juste milieu entre deux choix extrêmes qui ont leurs propres défauts :

1. «Chaîne indépendante» : $p_x(y) = p(y)$ (en discret $p_{ij} = p_j$).
2. «Mouvements locaux» : on ne fait de transition que vers des états voisins. C'est-à-dire que la densité $p_x(y)$ est localisée autour de x (les coefficients p_{ij} sont majoritairement nuls). Par exemple X est un long vecteur et ses voisins n'en diffèrent que par une coordonnée.
La détermination de $p_x(y)$ peut résulter d'une approximation de π restreinte au voisinage de X .

La première option nécessite que p soit assez proche de π , car elle provoquera sinon de nombreux rejets ($X_n = X_{n-1}$); elle est donc rarement choisie (voir cependant l'exemple du §IV.4.1). Par exemple si l'on est capable de réaliser une famille d'échantillons Y_1, \dots, Y_q assez représentatifs de π , on peut prendre pour p un mélange de gaussiennes centrées sur ces points (approximation non-paramétrique de π).

La deuxième option ne peut fonctionner que si π n'est pas trop multimodale, car ce type de transition défavorise les passages d'un mode à l'autre.

Notons que différents choix de p peuvent être combinés par mélange de loi, i.e. $(p, p') \rightarrow \varepsilon p + (1 - \varepsilon)p'$. Ceci peut permettre de limiter la proportion de rejets et favoriser la mobilité.

Améliorations récentes. On peut choisir p parmi une famille paramétrée, en optimisant le paramètre en cours d'algorithme de sorte à avoir le moins de rejets possibles [2]

Afin de garantir une meilleure mobilité, des méthodes utilisent une stratification de l'espace (algorithme de Wong-Landau) ou une cascade de chaînes de Markov (parallel tempering sampler, equi-energy sampler [2]).

IV.3.2 Simulation de graphes.

On reprend l'exemple du § II.4.2. On veut simuler des réseaux ayant la probabilité requise mais en se restreignant à l'ensemble \mathcal{R} de ceux où les points a et b ne sont pas connectés. La solution naturelle est, pour chaque i , de prendre pour p_{ij} la mesure uniforme sur tous les réseaux $j \in \mathcal{R}$ qui ne diffèrent de i que par l'état d'une connexion; on appelle cet ensemble V_i . On a donc en cas de rétablissement d'une connexion $f_j/f_i = (1 - p)/p$ et

$$q = \min \left(1, \frac{(1 - p)|V_i|}{p|V_j|} \right)$$

où p est la probabilité de perte de cette connexion; en cas de perte p est remplacé par $1 - p$ dans cette formule. L'indécomposabilité vient de ce que l'on peut toujours arriver à l'état où toutes les connexions sont coupées.

Une méthode plus simple est de prendre pour p_{ij} la mesure uniforme sur tous les réseaux j qui ne diffèrent de i que par l'état d'une connexion, et $f_j = 0$ si $j \notin \mathcal{R}$. Elle semble demander moins de calculs car p_{ij} est constant mais risque de causer davantage de rejets, de même pour l'échantillonneur de Gibbs.

IV.3.3 Marche aléatoire sans recoupement (self-avoiding random walk)

Dans cet exemple, on réalise un algorithme de Metropolis où f vaut 0 ou 1 et les p_{ij} sont constants et donc $q \in \{0, 1\}$. La marche aléatoire dans \mathbb{Z}^d est le processus

$$W_k = \Delta_1 + \Delta_2 + \dots + \Delta_k, \quad W_0 = 0$$

où Δ_i est tiré uniformément parmi l'ensemble \mathcal{D} des vecteurs de la base canonique et de leur opposés. On se déplace donc à chaque instant d'une unité dans une des $2d$ directions possibles tirée au hasard. La simulation d'un tel processus ne pose évidemment aucune difficulté. La loi de (W_1, \dots, W_K) est simplement la distribution uniforme sur toutes les trajectoires possibles.

La marche aléatoire sans recoupement de longueur K dans \mathbb{Z}^d est le même processus dont la loi est conditionnée à l'absence de recoupement. Sa distribution est donc uniforme sur l'ensemble

$$E = \{(W_1 \dots W_K) \in \mathbb{Z}^{d \times K} : \|W_i - W_{i-1}\| = 1, \quad \|W_1\| = 1, \quad W_i \neq W_j \text{ si } i \neq j\}.$$

En dimension trois, on modélise ainsi les polymères, par exemple le polyéthylène $\dots CH_2 - CH_2 - CH_2 \dots$ où W_k représente la position de la k -ième base. Les simulations⁴ confirment bien la relation observée expérimentalement entre la longueur du polymère et le nombre de bases $E[\|W_K\|^2] \propto K^{2\nu}$ avec la bonne valeur de ν .

La méthode du rejet pour simuler ces trajectoires marchera très mal car il y a proportionnellement fort peu de trajectoires sans recoupement (particulièrement si $d = 2$). On se propose de simuler une chaîne de Markov sur E .

4. N. Madras, G. Slade, *The self-avoiding walk*, Birkhäuser, Boston, 1993.

Soit \mathcal{T} l'ensemble des permutations T de \mathcal{D} telles que $T(-v) = -Tv$ (en d'autres termes T correspond à une isométrie préservant \mathcal{D}) alors pour tout $T \in \mathcal{T}$ et $1 \leq k \leq K$ on peut définir

$$\begin{aligned} T_k(W_1, \dots, W_K) &= (W'_1, \dots, W'_K) \\ W'_i &= \Delta'_1 + \Delta'_2 + \dots + \Delta'_i, \\ \Delta'_j &= \begin{cases} \Delta_j & j < k \\ \Delta'_j = T(\Delta_j) & j \geq k. \end{cases} \end{aligned}$$

L'application T_k fait une isométrie sur la fin de la marche sans modifier le début. On tire successivement les X_n :

1. Tirer uniformément k dans $\{1, \dots, K\}$ et T dans \mathcal{T} et poser $X = T_k X_{n-1}$
2. Si X est sans recoupement, alors $X_n = X$, sinon $X_n = X_{n-1}$.

Si $i \neq j$ et $i, j \in E$, alors $p_{ij} = (K|\mathcal{T}|)^{-1}$. La vérification de l'indécomposabilité est difficile (il s'agit de montrer que l'on peut toujours déplier la marche pour la mettre dans l'état où tous les Δ_j sont égaux).

IV.3.4 Méthode de rejet

Si la loi cible π a une densité de la forme ψg où ψ est la mesure invariante d'un noyau de transition P et g est connu à une constante multiplicative près, on peut par une méthode de rejet réaliser simplement une chaîne de probabilité invariante π :

28 - COROLLAIRE

Soit P une matrice de transition ψ -réversible. et g un vecteur ≥ 0 . Les transitions de l'algorithme du § IV.3.1 où (IV.3) est remplacé par

$$q = \min(1, g_j/g_i)$$

réalisent une chaîne de Markov réversible de mesure invariante $\pi \propto g\psi$.

Ce résultat est un corollaire du théorème 27 avec $f = g\psi$ car la réversibilité implique que $p_{ji}/p_{ij} = \psi_i/\psi_j$.

IV.4 Applications à l'estimation. Méthodes MCMC

Les applications données ici concernent l'estimation; la référence [18] contient beaucoup d'informations et d'exemples concernant l'estimation bayésienne. Pour d'autres exemples, voir les exercices ainsi que le chapitre suivant.

IV.4.1 Maximum de vraisemblance

Soit une famille de lois de probabilités paramétrées par θ , de la forme

$$p_\theta(X) = \frac{Q(X, \theta)}{Z(\theta)}$$

où la fonction $Q(X, \theta)$ est simple à calculer et la constante de normalisation $Z(\theta)$ est en revanche très difficile à calculer. On a vu au § IV.3.2 un exemple d'une telle situation (avec $\theta = p$) et l'on en verra d'autres au § IV.6. Dans le cas continu, si la mesure de référence est la mesure de Lebesgue, on a $Z(\theta) = \int Q(x, \theta) dx$ où l'intégrale est sur \mathbb{R}^d , d pouvant être très grand, et dans le cas discret, $Z(\theta) = \sum_x Q(x, \theta)$ où la somme s'étend à un ensemble extrêmement grand.

Soit $(X_i)_{1 \leq i \leq n}$ une suite de réalisations indépendantes de loi p_{θ^*} , θ^* inconnu. Il est simple de vérifier que le gradient du logarithme de la vraisemblance s'écrit

$$\sum_{i=1}^n \nabla_{\theta} \log Q(X_i, \theta) - nE_{\theta}[\nabla_{\theta} \log Q(Y, \theta)].$$

Un algorithme de simulation (Metropolis, Gibbs ou autre) permet d'estimer le deuxième terme pour toute valeur de θ , et donc de faire des algorithmes (itératifs) de calcul de $\hat{\theta}_{MV}$, le plus simple étant l'algorithme de gradient stochastique :

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \gamma_k \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla_{\theta} \log Q(X_i, \theta_k) - \nabla_{\theta} \log Q(Y_k, \theta_k) \right)$$

où Y_k a été simulé selon P_{θ_k} et γ_k est une suite positive décroissant vers 0 (ou en pratique constant assez petit..., voir le chapitre VII). C'est un algorithme de gradient où le signe d'espérance a été oublié.

Exemple : réseaux sociaux. Wasserman et Pattison⁵ considèrent N individus (29 enfants, 12 garçons et 17 filles) et observent les 29^2 variables X_{ij} valant 1 si l'individu i pense avoir des liens privilégiés avec j et 0 sinon. On convient que $X_{ii} = 0$. Ces v.a. réalisent donc un graphe orienté dont les sommets sont les individus. On considère la loi de probabilité paramétrée par $\theta \in \mathbb{R}^4$

$$P(x_{ij}, 1 \leq i, j \leq N) = Z(\theta)^{-1} \exp \left\{ \theta_1 \sum_{i,j} x_{ij} + \theta_2 \sum_{i,j} x_{ij} x_{ji} + \theta_3 \sum_{i,j,k} x_{ij} x_{jk} x_{ik} + \theta_4 \sum_{i,j,k} x_{ij} x_{jk} x_{ki} \right\}$$

Si $\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = 0$, les X_{ij} sont indépendants et $p = (1 + e^{-\theta_1})^{-1}$ est la probabilité qu'un lien se tisse entre deux individus. Les autres coefficients sont associés à la «réciprocité», la «transitivité», et la «cyclicité» des relations. L'interprétation brute de ces coefficients est difficile.

Pour simuler des réalisations (Y_{ij}) du tableau sous P_{θ} , une méthode efficace dans notre exemple consiste à utiliser l'algorithme de Metropolis avec tirages indépendants ($p_{ij} = p_j$) où chaque étape tous les Y_{ij} sont tirés indépendamment selon un Bernoulli de paramètre p , moyenne empirique des X_{ij} .

Les auteurs comparent⁶ les deux modèles obtenus avec seulement les filles et seulement les garçons. On n'observe pas que θ_3 ou θ_4 soit significativement non nul et l'on trouve $\theta = (0.166, 0.22)$ pour les filles et $\theta = (0.127, 0.07)$ pour les garçons ; il y a donc une réciprocité plus forte chez les filles ; en fait la statistique $\sum_{i,j} x_{ij} x_{ji}$ chez les garçons prend une valeur tout-à-fait vraisemblable sous l'hypothèse $\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = 0$, ce qui se vérifie par simulation sous cette loi avec le θ_1 estimé ; ce n'est pas le cas chez les filles. Cependant la petitesse de l'échantillon rend la conclusion difficile.

Ils considèrent également le modèle où le premier terme est séparé en 4 selon le sexe de i et j , ce qui fait trois paramètres en plus ; une différence significative entre ces derniers montre qu'il y a davantage de garçons prétendant avoir des liens privilégiés avec des filles que le contraire : on trouve $\theta = (\theta_{1ff}, \theta_{1gg}, \theta_{1fg}, \theta_{1gf}, \theta_2) = (0.24, 0.14, -1.5, -0.4, 0.37)$.

IV.4.2 Echantillonnage postérieur. Modèle bayésien hiérarchique

L'estimation au maximum de vraisemblance est souvent difficile à réaliser. Une méthode simple pour contourner ce problème est de se placer dans un cadre bayésien et de simuler des réalisations du paramètre sous sa loi a posteriori, c.-à-d. conditionnelle aux observations ; un avantage annexe est que la variabilité observée donne une idée de l'incertitude d'une estimation par le mode ou la moyenne (ou autre) de cette loi.

Illustrons par le cas du modèle bayésien hiérarchique ; c'est un modèle bayésien où la loi du paramètre est elle-même paramétrée par un modèle bayésien. Prenons un exemple de Cohen, Nagin, Wallstrom, et

5. S. Wasserman, P. Pattison, "Logit models and logistic regressions for social networks. I. An introduction to Markov graphs and p ". *Psychometrika* 61, no. 3, 401-425, 1996. kentucky.psych.uiuc.edu/pstar.

6. Ils font l'estimation des paramètre avec une pseudo-vraisemblance.

Wasserman⁷. Pour chaque individu arrêté dans le comté de Los Angeles en 1990 on s'intéresse au nombre Y_i d'arrestations dans le passé (la dernière non-incluse). Ces données sont séparées en différents groupes selon le type d'infraction (« trafic de drogue », « possession de drogue », « cambriolage », « vol ») ou selon le taux l'emprisonnement, ou selon l'année (1986 ou 1990). On postule un modèle Poissonien :

$$Y_i | \lambda_i \sim \text{Poisson}(\lambda_i t_i)$$

$$\lambda_i \sim \text{Gamma}(\alpha, \beta) \quad (\text{densité : } \beta^{-\alpha} \lambda^{\alpha-1} e^{-\lambda/\beta} / \Gamma(\alpha))$$

où t_i est l'âge du sujet moins 18 ans. Les λ_i sont donc indépendants $\text{Gamma}(\alpha, \beta)$ (moyenne $\mu = \alpha\beta$, variance $\sigma^2 = \alpha\beta^2$) et conditionnellement à λ_i , Y_i suit la loi $\mathcal{P}(\lambda_i t_i)$ ⁸. Comme dans le cas de modèles mixtes, on donne une structure aléatoire aux paramètres (les λ_i) car ils peuvent difficilement être estimés et leur valeur individuelle intéresse peu : c'est leur distribution qui caractérise le comportement du groupe.

On se donne une distribution a priori sur les paramètres⁹

$$\pi(\alpha, \beta) \propto \{\alpha(1 + \beta)^2\}^{-1}$$

qui correspond à une mesure uniforme pour $(\log \mu, 1/(1 + \beta))$. L'idée est que la distribution de λ dépend du groupe auquel appartient l'individu, et la distribution sur α, β correspond à la distribution des différents groupes. La loi de (α, β, λ) sachant les observations s'obtient par la formule de Bayes

$$p(\alpha, \beta, \lambda | Y) = P(Y | \alpha, \beta, \lambda) P(\lambda | \alpha, \beta) P(\beta, \alpha) P(Y)^{-1}$$

$$\propto P(Y | \alpha, \beta, \lambda) P(\lambda | \alpha, \beta) \pi(\beta, \alpha)$$

$$\propto \prod_i \lambda_i^{Y_i + \alpha - 1} e^{-\lambda_i(t_i + 1/\beta)} \frac{\beta^{-n\alpha}}{\Gamma(\alpha)^n \alpha (1 + \beta)^2}$$

(des termes ne dépendant que des Y_i et des t_i on été éliminés). Bien que $\pi(\alpha, \beta)$ ne soit pas d'intégrale finie, la mesure conditionnelle ci-dessus est bien finie¹⁰. On peut donc simplement simuler des échantillons de (α, β, λ) sous cette loi (« loi a posteriori ») avec un échantillonneur de Gibbs, couplé à la méthode de Metropolis pour α et β (« Metropolis within Gibbs »). Les auteurs obtiennent ainsi la distribution a posteriori du paramètre $\mu = \alpha\beta$ (nombre moyen d'arrestations par an après 18 ans) dans les différents groupes. Ils observent en particulier que les trafiquants de drogue ayant subi une peine de prison ont un taux d'arrestation pour des délits non liés à la drogue significativement inférieur aux autres prisonniers, ce qui correspond à une politique de fort emprisonnement des trafiquants dans les années 1986-1990.

IV.4.3 Données manquantes 1 : Modèle bayésien

On dispose d'une famille paramétrique de lois candidates $p_\theta(X)$ pour un ensemble de données X . Il arrive que certaines données manquent. On note $X = (Y, Z)$, où Y est la partie observée et Z la partie manquante (par exemple X est une matrice dont les lignes sont des vecteurs gaussiens i.i.d. mais certains éléments manquent et θ contient les paramètres de la gaussienne). Ceci rend les algorithmes d'estimation de θ assez difficiles à réaliser. On suppose dans la suite que l'on sait simuler facilement, pour θ donné, la loi de X sachant Y (c.-à-d. de Z sachant Y).

Soit le modèle bayésien

$$p(\theta, X) = \pi(\theta) p_\theta(X).$$

7. J. Cohen, D. Nagin, G. Wallstrom, L. Wasserman, "Hierarchical Bayesian Analysis of Arrest Rates", *J. Am. Stat. Ass.*, vol 93, 444, 1260-1270, 1998. www.stat.cmu.edu/tr/tr636/tr636.html.

8. Pour une discussion concernant ce modèle, voir aussi R. BERK, J.M. MACDONALD, "Overdispersion and Poisson Regression", Sept. 2008, Volume 24, Issue 3, pp 269-284.

9. Voir l'article pour la justification ; le fait que cette « loi » ne soit pas une probabilité est un défaut couramment accepté en théorie bayésienne. La « distribution » $d\alpha/\alpha$ sur \mathbb{R}_+ est souvent utilisée pour un paramètre positif en absence d'information car elle est invariante par changement d'échelle linéaire ; c'est la distribution uniforme pour $\log(\alpha)$.

10. Nous ne détaillons pas cet exercice : l'intégrale par rapport aux λ_i se fait en utilisant la densité de la loi gamma. Remarquer ensuite que si $Y_i > 0$, $\Gamma(\alpha + Y_i) = (\alpha + Y_i - 1) \dots (\alpha + 1) \alpha \Gamma(\alpha)$, ce qui permet alors de majorer l'intégrale restante, si un des Y_i et un des t_i est > 0 , par $C \int \beta^p (1 + \beta)^{-\alpha-1} (\alpha + 1)^q d\alpha d\beta$ (pour certains $C, p, q > 0$) qui est bien fini.

Si X était observé, la méthode bayésienne consisterait à calculer $E[\theta|X]$. Ici, on calculera $E[\theta|Y]$. Ceci requiert un calcul d'intégrale compliqué qui peut se réaliser simplement par simulation en produisant des réalisations de (θ, Z) selon $f(\theta, Z) \propto \pi(\theta)p_\theta(Y, Z)$ (Y est fixe dans cette formule) par méthode de Gibbs en alternant sur θ et Z (la simulation de Z est un échantillonnage postérieur). Notons qu'on obtient même une approximation de la distribution conditionnelle de θ , et donc en particulier une variance d'estimation. L'exemple du § IV.4.2 peut être considéré comme un cas de données manquantes (les λ_i).

Exemple : le modèle tobit. Soit le modèle de régression $X_i \sim \mathcal{N}(a_i\beta, \sigma^2)$; pour chaque individu i , a_i est le vecteur (ligne) de régression. On observe $Y_i = \max(X_i, 0)$ et les a_i .

Ce modèle a été introduit par James Tobin¹¹ (celui de la taxe) pour la situation où Y_i est le rapport entre la dépense en biens durables et le revenu annuel de l'individu i ; a_{i1} est son âge et a_{i2} est le rapport entre le montant de ses biens en actifs et son revenu annuel. Ce modèle permet d'expliquer simplement l'occurrence d'une dépense nulle avec probabilité non négligeable.

Si l'on se donne une probabilité a priori $\pi(\theta)$ pour le paramètre $\theta = (\beta, \sigma)$ la méthode de Gibbs reviendra à boucler sur les deux étapes (les détails sont laissés au lecteur) :

1. Tirage de X sachant θ et Y : si $Y_i > 0$ alors $X_i = Y_i$, sinon simuler X_i selon la loi $\mathcal{N}(a_i\beta, \sigma^2)$ conditionnée par le fait d'être négatif.
2. Tirage de θ sachant X : simuler (β, σ) selon $\sigma^{-n} \exp\{-\sum_i (X_i - a_i\beta)^2 / 2\sigma^2\} \pi(\theta)$.

Exemple : le modèle probit multivarié. Il s'agit d'un modèle basé sur le même principe pour modéliser des vecteurs de ± 1 , par la formule $Y_i = \text{signe}(X_i)$ (le signe est pris composante par composante) et $X_i \sim \mathcal{N}(a_i\beta, R)$, où R est une certaine matrice, également à estimer, possiblement paramétrée¹².

IV.4.4 Données manquantes 2 : L'algorithme EM

Nous référons à [30] pour un article «tutoriel» sur le sujet. On va voir que la situation typique correspondant à ce paragraphe est celle où Y suit un modèle de mélange et que l'adjonction de la variable latente Z exprimant le terme du mélange choisi résulte en une famille exponentielle de lois $p_\theta(Y, Z)$, ce qui fait que les problèmes d'estimation seraient considérablement simplifiés si l'on connaissait Z (cf l'exemple après l'équation (IV.6)).

L'algorithme du maximum de vraisemblance consiste à maximiser la probabilité des données observées :

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} p_\theta(Y), \quad p_\theta(Y) = \int p_\theta(Y, z) dz \quad (\text{IV.4})$$

où l'on note également par abus p_θ la loi des données observées. Souvent cette intégrale est incalculable, mais *on est capable de simuler les données manquantes sous leur loi conditionnelle aux observations* $p_\theta(Z|Y)$. La remarque importante est que la solution de l'équation suivante

$$\theta = \arg \max_{\theta'} H(\theta', \theta), \quad H(\theta', \theta) = \int \log(p_{\theta'}(Y, z)) p_\theta(z|Y) dz \quad (\text{IV.5})$$

est solution de (IV.4) (tout au moins les conditions du premier ordre sont identiques) car une solution de cette équation vérifie

$$0 = \nabla_{\theta'} H(\theta', \theta)|_{\theta'=\theta} = \int \frac{\nabla p_\theta(Y, z)}{p_\theta(Y, z)} \frac{p_\theta(Y, z)}{p_\theta(Y)} dz = p_\theta(Y)^{-1} \nabla_\theta \int p_\theta(Y, z) dz.$$

L'algorithme EM consiste à fabriquer la suite

$$\theta_{n+1} = \arg \max_{\theta} H(\theta, \theta_n). \quad (\text{IV.6})$$

11. «Estimation of Relationships for Limited Dependent Variables», pp. 24-36 *Econometrica*, Vol. 26, No. 1, 1958

12. Pour des applications, voir par exemple : C. Stefanescu, B.W. Turnbull, «On the Multivariate Probit Model for Exchangeable Binary Data with Covariates», *Biometrical Journal* 47 (2005) 2, 206-218.

Ou encore : S. Chib, E.S. Greenberg, «Analysis of Multivariate Probit Models», *Biometrika*, 85 (1998) 2, 347-361.

On montre que cette suite satisfait la propriété de croissance $p_{\theta_{n+1}}(Y) \geq p_{\theta_n}(Y)$ (exercice IV.7.3.17), et que sous des hypothèses assez générales θ_n converge vers une solution de (IV.5).

Parfois la fonction H peut être calculée et minimisée explicitement, c'est le cas par exemple si les Y_i forment une suite i.i.d. d'un mélange de deux gaussiennes de variance σ^2 connue et de moyennes α et β avec poids $1-p$ et p . Ici $\theta = (p, \alpha, \beta)$, auquel cas on trouve sans difficulté, en prenant pour Z la variable de Bernoulli qui vaut 0 si la première gaussienne a été choisie et 1 sinon ($E[Z] = p$) :

$$H(\theta, \theta_0) = \sum_i (1 - w_i) \log((1-p)g(Y_i - \alpha)) + w_i \log(pg(Y_i - \beta))$$

$$w_i = \frac{p_0 g(Y_i - \beta_0)}{(1-p_0)g(Y_i - \alpha_0) + p_0 g(Y_i - \beta_0)}$$

où g est la densité de la gaussienne centrée de variance σ^2 . Le poids w_i s'interprète comme la probabilité que Z_i vaille 1 sachant Y_i .

Si l'on ne dispose pas de forme explicite pour H , l'approximation de l'intégrale par une moyenne conduit à l'algorithme suivant (SEM)

$$\theta_{n+1} = \arg \max_{\theta} \sum_{k=1}^K \log(p_{\theta}(Y, z_k)) \quad (\text{IV.7})$$

où les z_k sont tous simulés selon la loi $p_{\theta_n}(z|Y)$; c'est cette simulation qui peut faire intervenir l'échantillonneur de Gibbs comme on va le voir au paragraphe suivant. Mais il arrive également qu'elle doive se faire à l'aide d'un échantillonneur préférentiel si l'on ne sait pas directement simuler la loi de Z sachant Y (typiquement on sait plutôt simuler Y sachant Z , l'observation sachant la donnée manquante; voir l'exemple du § IV.5.1 ou les modèles d'état du § V.5.2) et l'on utilisera une approximation $p_n(z)$ (en pratique choisie astucieusement au vu de la situation)

$$\theta_{n+1} = \arg \max_{\theta} \sum_{k=1}^K \log(p_{\theta}(Y, z_k)) \frac{p_{\theta_n}(z_k|Y)}{p_n(z_k)} = \arg \max_{\theta} \sum_{k=1}^K \log(p_{\theta}(Y, z_k)) \frac{p_{\theta_n}(z_k, Y)}{p_n(z_k)}$$

La formule (IV.7) s'interprète comme un maximum de vraisemblance où les données manquantes ont été simulées à l'aide de l'estimée précédente. Pour avoir convergence K doit bien entendu tendre vers l'infini avec n , ce que l'on ne fait pas en pratique car la limite n'est qu'une estimée du vrai paramètre. Noter également qu'il est inutile, surtout au début d'essayer d'atteindre le maximum avec une grande précision. Voir également l'algorithme stochastique du § VII.1.4.

Application : salamandres. On considère une population de I salamandres femelles et J mâles¹³. On tente d'accoupler chaque femelle avec chaque mâle. Les observations consistent donc en les IJ variables Y_{ij} valant 0 ou 1 selon le succès de l'entremise. On considère le modèle logistique mixte

$$P(Y_{ij} = 1) = \pi_{ij}$$

$$\log\left(\frac{\pi_{ij}}{1 - \pi_{ij}}\right) = \mu + u_i + v_j.$$

Les variables latentes u_i et v_j ne sont pas observées, mais sont i.i.d de loi $\mathcal{N}(0, 1/\theta_u)$ et $\mathcal{N}(0, 1/\theta_v)$. Conditionnellement à u et v les Y_{ij} sont donc indépendants avec la loi donnée ci-dessus.

Notons $\theta = (\mu, \theta_u, \theta_v)$ et $z = (u, v)$. La probabilité de Y, u, v est donc

$$P_{\theta}(Y, z) = P_{\theta}(Y|u, v) P_{\theta}(u, v)$$

$$= c \theta_u^{I/2} \theta_v^{J/2} \prod_{ij} \frac{\exp\{Y_{ij}(\mu + u_i + v_j)\}}{1 + \exp\{\mu + u_i + v_j\}} \exp\left\{-\frac{\theta_u}{2} \sum_i u_i^2 - \frac{\theta_v}{2} \sum_j v_j^2\right\}.$$

13. P. McCullagh, J.A. Nelder, *Generalized Linear Models*, Chapman & Hall, 1989.

En revanche la probabilité de Y seul s'obtient en intégrant cette expression par rapport à (u, v) ce qui conduit à une intégrale multiple en dimension élevée sur laquelle il est très difficile de travailler.

Il faudra simuler (u, v) selon sa loi sachant Y . Ceci peut se faire par un échantillonneur de Gibbs. La simulation de chaque u_i n'est elle-même pas très évidente et peut se faire par le biais d'une méthode de rejet ; voir aussi l'étude de McCulloch¹⁴ pour un algorithme un peu différent.

IV.5 Processus ponctuels

IV.5.1 Échantillonnage postérieur des processus ponctuels

Soit une paire de variables aléatoires (X, Y) où Y est observée et X est la variable recherchée. La méthode d'**échantillonnage postérieur** consiste à simuler des réalisations de X conditionnellement à Y . Ceci permet d'avoir une estimée de la loi de X conditionnellement à Y .

Rappelons la définition (informelle) du **processus de Poisson ponctuel** sur E (généralement $E \subset \mathbb{R}^d$) d'intensité μ , mesure finie sans atome sur E : une réalisation de ce processus est un ensemble $X = \{X_1, \dots, X_N\}$ où N est tiré selon une loi de Poisson de paramètre $\mu(E)$ et les X_i sont tirés indépendamment dans E selon $\mu(\cdot)/\mu(E)$. Ces processus permettent de modéliser par exemple la distribution de certaines espèces dans les forêts¹⁵. Voir aussi [11] pour des exemples d'études en biologie, et [23]. Rappelons que la superposition $Z = \{X_1, \dots, X_N, X'_1, \dots, X'_p\}$ de deux processus de Poisson ponctuels indépendants d'intensité μ et μ' est un processus de Poisson d'intensité $\mu + \mu'$. Dans notre exemple¹⁶, $Y = (Y_1, \dots, Y_p)$ est l'ensemble des cas de leucémie dans l'état de New-York entre 1978 et 1982 (ensemble de points du plan). L'observation semble montrer que ces points ne sont pas uniformément répartis mais forment des groupes. Il s'agit de voir si les cas de leucémie sont plus fréquents au voisinage de sites de déchets. Les auteurs présupposent donc l'existence d'un vecteur $X = (X_1, \dots, X_n)$, ensemble des centroïdes des groupes ; X est un processus de Poisson de mesure uniforme sur l'état de New-York E de masse totale λ et on réalise des Y_i selon un processus de Poisson de mesure $\kappa \sum_i e^{-\|X_i - y\|^2/2\sigma^2}$ (superposition de processus de Poisson générés par chaque X_i)¹⁷. Si les paramètres du modèle $(\lambda, \kappa, \sigma)$ sont connus on peut, ayant Y à sa disposition, simuler X sous sa loi conditionnelle, ce qui n'est pas simple car on a maintenant affaire à un processus dont la densité par rapport à sa loi d'origine est, par la formule de Bayes $(P(X|Y) = P(Y|X)P(X)/P(Y))$ proportionnelle à

$$q(x) = \prod_j \left(\sum_i e^{-\|x_i - Y_j\|^2/2\sigma^2} \right).$$

Le paramètre κ ne joue donc aucun rôle dans la loi a posteriori de X . Noter que $q(\emptyset) = 0$ (sauf si $n = 0$). Les auteurs se proposent de simuler de cette loi pour voir si la distribution des X_i se concentre à proximité des sites de déchets.

Le procédé suivant¹⁸, justifié à l'exercice IV.7.4.19, permet de simuler un processus ponctuel de densité $q(x)$ par rapport au processus d'intensité μ . Il nécessite de se donner pour tout x un noyau de proposition $p(\xi; x)$ qui est une densité loi de probabilité sous μ : $\int p(\xi, x)\mu(d\xi) = 1$. P. ex. le noyau constant $p(\xi; x) = 1/\mu(E)$. Dans ce qui suit, $\mathcal{U}(A)$ désigne la mesure uniforme sur A et on note ξ pour $\{\xi\}$:

14. C.E. McCulloch, "Maximum likelihood algorithm for generalized linear mixed models", *J. Am. Stat. Ass.*, 92, 162-170, 1997.

15. R.L. Wolpert, K. Ickstadt, "Poisson/gamma random field models for spatial statistics", *Biometrika* 85, no. 2, 251-267, 1998.

16. M.A. Loizeaux, I.W. McKeague, "Perfect sampling for point process cluster modelling", 2002. www.columbia.edu/~im2131/ps/pcluster.ps

Loizeaux et McKeague utilisent en fait ces données pour illustrer l'échantillonnage parfait et ceci influe légèrement sur le modèle car il sont obligés d'introduire un paramètre ε supplémentaire.

17. Cette modélisation où Y est un processus de Poisson dont l'intensité résulte elle-même de la réalisation d'un processus stochastique est caractéristique des **processus de Cox**.

18. On trouvera une version plus générale au chapitre 7 de [31].

1. Tirer $\xi \sim p(\xi; X_n)\mu(d\xi)$, $\eta \sim \mathcal{U}(x)$,
2. Soit $n = |x|$.

$$\text{Faire } \begin{cases} X_{k+1} = x \cup \xi & \text{avec probabilité } p_1 = \frac{1}{2} \min\left(\frac{q(x \cup \xi)}{(n+1)p(\xi; x)q(x)}, 1\right) \\ X_{k+1} = x \setminus \eta & \text{avec probabilité } p_2 = \frac{1}{2} \min\left(\frac{np(\eta; x \setminus \eta)q(x \setminus \eta)}{q(x)}, 1\right) \\ X_{k+1} = x & \text{avec probabilité } p_3 = 1 - p_1 - p_2. \end{cases}$$

IV.5.2 Simulation des «cluster Poisson process»

Il s'agit essentiellement du modèle considéré pour Y dans l'exemple du § IV.5.1.

Rappelons d'abord comment on produit une réalisation $X = \{X_i\}$ du processus de Poisson associé à un espace mesuré $(\mathcal{X}, \mathcal{F}, \mu)$, où la mesure $\mu(dx)$ est supposée σ -finie :

1. Décomposer \mathcal{X} en une réunion disjointe $\cup_i A_i$ d'ensembles de mesure finie
2. Pour chaque i , Tirer $N_i \sim \mathcal{P}(\mu(A_i))$ puis N_i v.a.i.i.d. de distribution μ restreinte à A_i normalisée :

L'ensemble formé des variables simulées sur \mathcal{X} forme une réalisation du P.P. (la loi du résultat ne dépend pas du découpage).

Le cadre général pour le cluster point process est le suivant : On se donne deux espaces $(\mathcal{X}, \mathcal{F}, \mu)$ et $(\mathcal{Y}, \mathcal{G})$, et un noyau $K(x, dy)$ défini sur $\mathcal{X} \times \mathcal{G}$. On suppose que pour tout x , $K(x, \mathcal{Y}) < \infty$, et que la mesure $\mu(dx)$ est σ -finie. Le processus associé $Y = \{Y_i\}$ se réalise de la façon suivante :

1. Réaliser le P.P. $X = \{X_i\}$ sur (\mathcal{X}, μ) .
2. Réaliser pour chaque i le P.P. d'intensité $K(X_i, dy)$, et réunir l'ensemble.
Ceci revient également à réaliser le P.P. d'intensité $\sum_i K(X_i, dy)$ (principe de superposition).

Considérons l'exemple simple suivant : $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$, $\mu(dx) = ae^{-bt}d\xi dt$ et $K(x, \cdot) = \mathcal{N}(x, tI_d)$. Même si l'on s'intéresse à simuler la restriction des Y_i à une zone bornée W de l'espace, il faut a priori simuler tous les X_i , c.-à-d. une infinité (ce ne serait pas le cas si le noyau $K(x, \cdot)$ avait un support toujours contenu dans une boule centrée en x et de rayon 1). D'un point de vue pratique on peut considérer comme raisonnable sur cet exemple de simuler la restriction de X à un voisinage assez grand de W . On peut cependant faire autrement :

Simulation effective. On cherche à simuler la restriction Y_W de Y à une partie «petite» $W \subset \mathcal{Y}$. La remarque essentielle est la suivante :

La restriction du processus X aux points qui ont un fils dans W est un P.P. d'intensité :

$$(1 - e^{-K(x, W)})\mu(dx). \quad (\text{IV.8})$$

Ce qui est une conséquence immédiate de la propriété (thinning) :

Si X est un P.P. et Z_i une suite de v.a.i.i.d. indépendante de X , et $g(x, z)$ une fonction mesurable, alors la restriction de X aux points tels que $g(X_i, Z_i) = 1$ est un P.P. d'intensité $P(g(x, Z) = 1)\mu(dx)$.

L'ALGORITHME est donc le suivant :

1. Réaliser le P.P. donné par (IV.8)
2. Réaliser pour chaque i le P.P. d'intensité $K(X_i, dy)1_{y \in W}$ conditionné à avoir au moins un point et réunir l'ensemble des points obtenus.

En pratique (IV.8) sera bien une mesure finie. Les seules questions qui restent sont relatives à la mise en œuvre effective de ces deux points.

Brix et Kendall¹⁹ proposent une méthode de rejet («thinning») consistant à utiliser un noyau dominant $L(x, dy) = \rho(x, y)^{-1}K(x, dy)$ avec $\rho \leq 1$ puis à jeter les points simulés avec probabilité $1 - \rho(X_i, Y_i)$.

Le fait que la loi des fils conditionnellement aux pères (les X_i) soit un processus de Poisson n'intervient pas, il suffit que Y soit une réunion de processus ponctuels indépendants conditionnellement à X , la loi de chacun ne dépendant que de X_i .

IV.6 Champs de Gibbs

Le but de la théorie des champs de Markov est de modéliser des tableaux de variables aléatoires dont la loi est caractérisée par une structure de corrélation particulière entre points proches. On ne s'intéressera qu'aux champs de Gibbs qui recouvrent quasiment tous les champs de Markov, et qui représentent ici le modèle adéquat ; la question plus générale des données spatiales est extensivement exposée dans [9] et [42]. Voir aussi l'article très riche de J. Besag [5]. On traite d'abord le cas où le champ prend ses valeurs dans un ensemble fini. La simulation réalisera une chaîne de Markov dont la mesure invariante correspond à la loi désirée.

IV.6.1 Définition des champs de Gibbs

Un des exemples phare pour les champs de Markov est une image numérisée²⁰ par exemple sur une grille de 256×256 pixels, chacun ayant un niveau de gris par exemple un entier compris entre 1 et 32. Un autre exemple présenté dans [5] est celui d'une culture de tomates dont certaines sont infectées : la variable aléatoire vaut 0 ou 1 selon que la plante est atteinte ou non.

Appelons S la grille et \mathcal{X} l'ensemble des niveaux de gris. Cette image sera alors considérée comme la réalisation d'un tableau de variables aléatoires indexées par les éléments de S .

30 - DÉFINITION

On appelle structure de voisinage sur un ensemble S une relation symétrique sur S , ou encore une structure de graphe non-orienté sur S : a est voisin de b si un arc joint a et b . On convient que a n'est pas voisin de a . On appelle clique un ensemble de points voisins entre eux.

Les points de S sont parfois appelés «sites». En traitement d'image on considère souvent les 4 ou 8 plus proches voisins. Dans le premier cas les cliques sont les ensembles de deux points à distance minimale et dans le deuxième ce sont les blocs carrés de 4 points et leurs parties (à vérifier !).

31 - DÉFINITION

Soit \mathcal{X} un ensemble fini et S un ensemble muni d'une structure de voisinage, on appelle champ de Gibbs une distribution de probabilité sur les tableaux X indexés par les éléments de S et à valeurs dans \mathcal{X} (c.-à-d. $X \in \mathcal{X}^S$) ayant la forme suivante :

$$P(X) = Z^{-1} e^{-\sum_C V_C(X_C)}$$

où la somme est prise sur toutes les cliques, $X_C = (X_a)_{a \in C}$, et les V_C sont des fonctions arbitraires finies. Z est une constante de normalisation.

$P(X)$ désigne ici soit la probabilité de X si \mathcal{X} est fini, soit la densité, si $\mathcal{X} = \mathbb{R}$.

19. Brix, Kendall : Simulation of cluster point processes without edge effects, *Adv. Appl. Prob.* 34, 267-280

20. Une référence classique est l'article précurseur de S. Geman et D. Geman : "Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images", *IEEE-PAMI*, vol. 6, No 6, nov. 1984.

En particulier, toute distribution est un champ de Gibbs pour la structure triviale où tous les points sont voisins (comme dans l'exemple du § IV.4.1). La constante Z est généralement complètement inconnue. Un exemple typique dans le cas des 4-voisinages est :

$$P(X) = Z^{-1} \exp \left\{ - \sum_{ij} \beta_1 (X_{ij} - X_{i-1,j})^2 + \beta_2 (X_{ij} - X_{i,j-1})^2 \right\}$$

où la somme est retrainte aux paires (i, j) telles que (i, j) , $(i-1, j)$ et $(i, j-1)$ appartiennent à la grille. Si $\beta_1 = \beta_2$, cette expression se réécrit

$$P(X) = Z^{-1} e^{-\beta \sum_{\|a-b\|=1} (X_a - X_b)^2}.$$

Dans le cas où $\mathcal{X} = \{-1, 1\}$, on a, les deux expressions

$$P(X) = Z^{-1} e^{-4\beta_1 N_h - 4\beta_2 N_v} = Z'^{-1} \exp \left\{ \sum_{ij} 2X_{ij} (\beta_1 X_{i-1,j} + \beta_2 X_{i,j-1}) \right\} \quad (\text{IV.9})$$

où N_h et N_v sont le nombre de cliques horizontales et verticales avec désaccord. On a ici choisi le même coefficient pour les cliques de même orientation de sorte à avoir une certaine stationnarité. On voit que si les β_i sont positifs, cette distribution a tendance à corréler positivement les voisins. Cette corrélation sera d'autant plus forte que le paramètre β_i sera grand.



FIGURE IV.2 – Deux réalisations du champ (IV.9) sur une grille 128×128 : une avec $\beta_1 = \beta_2 = 0,8$ et l'autre avec $\beta_1 = \beta_2 = 1,5$. On a utilisé l'échantillonneur de Gibbs.

32 - THÉORÈME

Soit un champ de Gibbs sur S , alors la loi conditionnelle de X_a sachant $(X_b)_{b \neq a}$ est donnée par

$$P(X_a | X_b, b \neq a) = Z_a^{-1} e^{-\sum_{C \ni a} V_C(X_C)}.$$

En particulier elle ne dépend que de X_b pour b voisin de a . Le facteur de normalisation Z_a est une fonction des X_b pour b voisin de a .

Si l'on revient à l'exemple (IV.9), il vient

$$P(X_{ij} | X_a, a \neq (i, j)) = Z_{ij}^{-1} \exp \{ 2X_{ij} (\beta_1 X_{i-1,j} + \beta_1 X_{i+1,j} + \beta_2 X_{i,j-1} + \beta_2 X_{i,j+1}) \}.$$

Noter que, comme on le voit sur cet exemple, la constante Z_a sera souvent calculable.

Le théorème de Hammersley-Clifford donne une réciproque : sous des conditions très générales, si la loi conditionnelle de X_a sachant les autres ne dépend que de X_b pour b voisin de a , alors le champ est un champ de Gibbs pour cette structure de voisinages (c.-à-d. : *Il existe des fonctions V_C ...*).

Les champs de Gibbs ont la propriété de maximum d'entropie suivante ([8] chap.12) : Parmi toutes les distributions dont les marginales sur chaque clique coïncident avec celles de P , P est celle dont l'entropie est maximale (c.-à-d. la plus diffuse, celle qui rajoute le moins de particularité supplémentaire).

Exemple : segmentation d'image. Afin de modéliser la présence de régions homogènes distinctes dans une image, on propose le modèle suivant : Une image est la réalisation d'une suite $(X_a, Y_a)_{a \in S}$ où les X_a (étiquette non-observée) sont des v.a. prenant leurs valeurs dans $\{1, \dots, r\}$ (numéros de région) et Y_a est le niveau de gris²¹. La loi de X est

$$P(X) = Z^{-1} e^{-\beta \sum_{\|a-b\|=1} 1(X_a \neq X_b)} = Z^{-1} e^{-\beta N}.$$

N est la longueur des frontières entre régions. La loi de Y sachant X est une suite de variables indépendantes, Y_i ayant une loi de densité $e^{U(y, X_i)}$ (par exemple et pour simplifier $\mathcal{N}(\mu(X_i), \sigma^2)$ où le paramètre $\mu(j)$ est le niveau de gris moyen de la région numéro j). On a donc finalement la loi liée :

$$P(X, Y) = P(X)P(Y|X) = Z^{-1} \exp \left\{ -\beta \sum_{\|a-b\|=1} 1_{X_a \neq X_b} + \sum U(Y_a, X_a) \right\}. \quad (\text{IV.10})$$

L'expression ci-dessus conduit à la loi de X sachant Y (qui est la seule variable observée) ce qui va permettre d'estimer les régions, par exemple en maximisant $P(X, Y)$ par rapport à X , ce qui n'est pas toujours un problème facile ; une simple simulation de X sous cette loi par un échantillonneur de Gibbs (**échantillonnage postérieur**) fera déjà apparaître les régions bien plus nettement que sur l'image de départ.

IV.6.2 Échantillonnage de Gibbs

L'échantillonneur de Gibbs du § IV.2 devient ici :

33 - ALGORITHME

Tirage de X' après X

1. Tirer a au hasard uniformément dans S .
2. Tirer une v.a selon la loi conditionnelle de X_a sachant les autres
3. On déduit X' de X en remplaçant X_a par cette nouvelle valeur.

Au lieu de tirer a au hasard on peut se donner un ordre à l'avance. Par exemple dans le cas des 4-voisinages, on peut renouveler d'abord les sites blancs (S est vu comme un damier) puis les noirs. Notons que le renouvellement des blancs peut se faire en parallèle puisque la distribution sur un site blanc ne dépend que des valeurs sur des sites noirs.

21. Par exemple dans l'article : J.M. Odobez, D. Chen, "Robust Video Text Segmentation and Recognition with Multiple Hypotheses", *Proc. of the ICIP*, sept. 2002, les auteurs considèrent 2 à 4 étiquettes selon le modèle, une des étiquettes représentant le niveau de gris d'un caractère, les autres représentant le fond.

Pour une application à des images de résonance magnétique nucléaire, voir l'article de B. Chalmond : "Image restoration using an estimated Markov model" *Signal Processing*, Vol.15, 2, pp 115-221, sept. 1988.

A. Lorette, X. Descombes et J. Zerubia utilisent également cette approche pour l'analyse automatique d'images satellitaires : "Texture Analysis through a Markovian Modelling...", § 4.2.2, *Int. J. of Computer Vision*, Vol. 36, N. 3, pp 1573-1405 (2000). www.inria.fr/rrrt/rr-3423.html.

Voir également : J. Besag, "On the Statistical Analysis of Dirty Pictures", *JRSS-B*, Vol. 48, No. 3., 1986, pp. 259-302.

IV.6.3 Algorithme de Metropolis

L'échantillonneur de Gibbs peut être un peu compliqué à mettre en œuvre, ce qui fait que parfois la méthode de Metropolis sera préférée. On est, avec les notations du §IV.3.1, dans la situation où

$$f(X) = e^{-\sum_C V_C(X_C)}.$$

La transition d'un état X à un autre X' va consister à tirer un site a au hasard et à modifier X_a par choix d'une valeur dans \mathcal{X} , si bien que X et X' coïncident sur $S \setminus \{a\}$; les états voisins d'un état donné sont donc en nombre $|S| \cdot |\mathcal{X}|$ et p_{ij} est pour tous i et j l'inverse de cette valeur. Le passage effectif au nouvel état X' se décidera donc avec probabilité

$$q = \min \left(1, e^{\sum_C V_C(X_C) - \sum_C V_C(X'_C)} \right) = \min \left(1, e^{\sum_{C \ni a} V_C(X_C) - V_C(X'_C)} \right). \quad (\text{IV.11})$$

Cette quantité locale est très facile à calculer; dans l'exemple des 4-voisinages, on a si $a = (i, j)$ et $\mathcal{X} = \{-1, 1\}$:

$$\sum_{C \ni a} V_C(X_C) - V_C(X'_C) = 4X_{ij}(\beta_1 X_{i-1,j} + \beta_1 X_{i+1,j} + \beta_2 X_{i,j-1} + \beta_2 X_{i,j+1}).$$

IV.6.4 Autres exemples

On considère ici des exemples où \mathcal{X} peut être infini. Si $\mathcal{X} = \mathbb{R}$ il suffit de considérer que P est la densité de la loi par rapport, par exemple, à la mesure de Lebesgue : $p(x) = Z^{-1} \exp\{-\sum_C V_C(x_C)\}$.

Champ gaussien autorégressif. On va supposer que $S = \{a_1, \dots, a_n\}$ est une partie finie de l'espace euclidien. Considérons la distribution pour $X = (X_a)_{a \in S}$:

$$\log p(X) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{a,b} (X_a - \mu_a) c_{ab} (X_b - \mu_b) + cst, \quad c_{aa} = 1 \quad (\text{IV.12})$$

où les μ_i sont des réels et la matrice $C = (c_{ab})_{a,b \in S}$ est définie positive. Il s'agit d'une distribution gaussienne. Il est facile de vérifier que la loi d'un X_a sachant les autres est une gaussienne de variance σ^2 et de moyenne :

$$\hat{X}_a = m_a - \sum_{b \neq a} c_{ab} X_b, \quad m_a = \sum_b c_{ab} \mu_b. \quad (\text{IV.13})$$

Les voisins de a sont donc les points b tels que $c_{ab} \neq 0$, et m_a est la moyenne de X_a sachant les autres nuls. Il se trouve que pour m et $C > 0$ donnés, P est la seule distribution satisfaisant cette spécification de loi conditionnelle. Souvent on préfère partir de cette spécification pour en déduire m et C , puis μ . Généralement c_{ab} ne dépendra que de $b - a$ (le champ recentré est stationnaire).

Par exemple dans le cas d'une grille régulière du plan, on pourra partir du modèle local

$$\hat{X}_{ij} = \frac{1}{4}(X_{i-1,j} + X_{i+1,j} + X_{i,j-1} + X_{i,j+1})$$

qui définit les m_a (nuls) et la matrice C (elle est bien positive). Pour les points $a = (i, j)$ du bord, si, par exemple, $(i+1, j)$ sort du domaine on se donne à l'avance une valeur fixe pour $X_{i+1,j}$ dont l'effet est d'ajouter un terme m_a .

Ce modèle est utilisé par exemple pour étudier le rendement de parcelles voisines [9] : X_a est la production de la parcelle a .

Attention, les erreurs de prédiction $X_a - \hat{X}_a$ ne sont pas des variables aléatoires indépendantes; pas plus que dans une série temporelle autorégressive, ne le sont les erreurs de prédictions utilisant passé et futur. En revanche, $X_a - \hat{X}_a$ est indépendante de $X_b, b \neq a$.

Modèle conditionnellement binomial. Considérons les données de mort subite de nouveau-né dans les 100 comtés de Caroline du Nord [9] pour les périodes 1974-1978 et 1979-1984. Pour chaque période on dispose d'un tableau à 100 lignes et 2 colonnes : la première colonne contient, pour a variant de 1 à 100, le nombre X_a de morts subites de bébés de moins d'un an dans le comté a , et la seconde le nombre n_a de naissances. Typiquement n_a est compris entre 500 et 30000 et X_a entre 0 et 50.

On a représenté sur la figure ci-dessous les données sur chaque période par une carte où l'on a placé pour chaque comté un cercle dont le diamètre est proportionnel au nombre de morts subites divisé par le nombre de naissances sur la même période (la valeur moyenne de cette quantité est 0,002) ; l'unité spatiale est la centaine de kilomètres (la figure est verticalement dilatée).

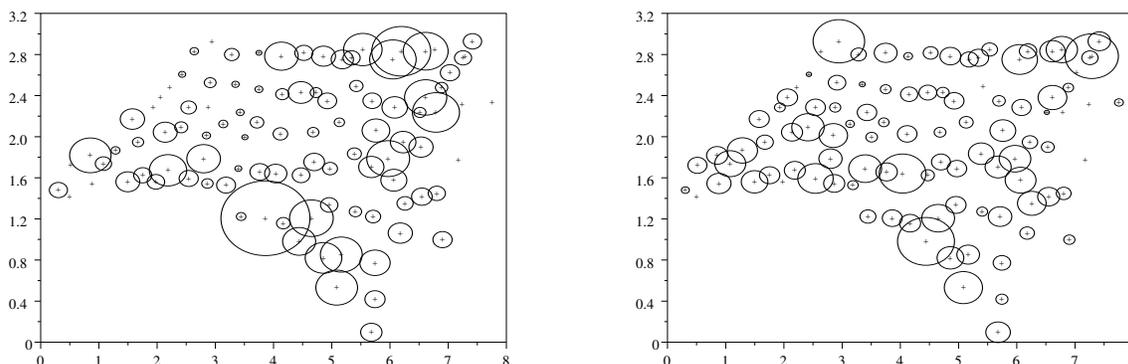
Une corrélation spatiale semble apparaître, elle serait due à l'existence d'une variable explicative spatialement corrélée (structure de la population).

Un modèle possible est le suivant (les n_a sont déterministes)

$$P(X) = Z^{-1} e^{\alpha \sum X_a + \frac{1}{2} \sum_{a,b} c_{ab} (X_a - qn_a)(X_b - qn_b)} \prod_a \frac{1}{X_a! (n_a - X_a)!} \quad (\text{IV.14})$$

avec $c_{aa} = 0$ et $c_{ab} = c_{ba}$. Il est conditionnellement binomial :

$$\text{Loi}(X_a | X_b, b \neq a) = \mathcal{B}\left(n_a, \frac{\lambda_a}{\lambda_a + 1}\right), \quad \lambda_a = \exp\left\{\alpha + \sum_b c_{ab} (X_b - qn_b)\right\} \quad (\text{IV.15})$$



On peut faire un modèle analogue en remplaçant la loi binomiale par une loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda_a)$; l'exemple ne s'y prête pas (cf exercice IV.7.5.24).

Ce modèle est visiblement surparamétré puisqu'il y a 4952 paramètres c_{ab} en jeu pour ici 100 observations. Une solution est de se donner une forme particulière, par exemple :

$$c_{ab} = \gamma d(a, b)^{-\delta} \quad \text{ou} \quad c_{ab} = \gamma 1_{d(a,b) < \delta}$$

où $d(a, b)$ est la distance entre les comtés a et b . Le modèle n'a plus pour paramètres que α, γ et δ . On peut également faire dépendre α de la période, $\alpha = \alpha_p$, ce qui fait alors 5 paramètres.

En dehors de l'intérêt de l'estimation des paramètres, on peut également considérer ce modèle comme une base pour faire des tests ; par exemple, on pourra tester les hypothèses « $\alpha_0 = \alpha_1$ » (pas de différence significative entre les périodes) ou encore « $\gamma = 0$ » (pas de corrélation significative entre comtés proches).

Il s'avère utile d'ajouter un terme $\beta \sum n_a X_a$ à l'exponentielle de (IV.14) ce qui revient à remplacer α par $\alpha + \beta n_a$ dans (IV.15). Une estimation par maximisation de pseudo-vraisemblance (on choisit ici $l(\theta) =$

$\sum_{p=1}^2 \sum_a \log P(X_a^p | X_b^p, b \neq a)$ avec $c_{ab} = \gamma 1_{d(a,b) < 0.64}$ (ce qui fait une moyenne de 7 termes non nuls par ligne), donne $\alpha = -6.1$, $\gamma = 0.01165$, $q = 0.00188$ et $\beta = -1.64 \cdot 10^{-5}$. L'estimation à l'aide d'un logiciel se fait en remarquant que la maximisation de $l(\theta)$ correspond à l'estimation d'un modèle logistique (les X_b dans l'expression de λ_a étant considérés comme des variables explicatives); les paramètres estimés sont ici considérés comme significativement non nuls. Le fait que $\beta \neq 0$ vient probablement de ce que n_a est corrélé avec des variables explicatives manquantes.

Modèle d'état spatial. Nous nous basons ici sur un exemple particulier²² qui suffit à présenter l'idée générale, qui est que les observations Y_i sont fonctions aléatoires d'un processus gaussien X .

On mesure sur 34 pins 4 variables : la quantité de résine présente à 1m50 de haut et à 2m70, et la présence ou non de lésions à ces deux hauteurs. Chaque Y_i , $1 \leq i \leq 34$, est donc un vecteur de $\mathbb{R}_+^2 \times \{0,1\}^2$. Les auteurs présupposent l'existence de variables non observées («latentes») $X_i \in \mathbb{R}^2$ telles que la loi de chaque Y_i conditionnellement à $(Y_j)_{j \neq i}$ soit issue d'un modèle linéaire généralisé de variable explicative X_i :

$$Y_i \sim N(\mu_1, \sigma_1^2) \otimes N(\mu_2, \sigma_2^2) \otimes \mathcal{B}(1, (1 + e^{-\mu_3})^{-1}) \otimes \mathcal{B}(1, (1 + e^{-\mu_4})^{-1}), \quad \mu_k = \alpha_k + \langle \beta_k, X_i \rangle.$$

ce qui fait 12 paramètres. X_i est modélisé comme un processus spatial gaussien, typiquement centré de matrice de covariance diagonale de la forme $Cov(X_i, X_j) = \rho(d_{ij})Id$, où d_{ij} est la distance entre les pins i et j et $\rho(0) = 1$, ρ étant une fonction à préciser²³.

L'estimation de ce modèle utilise l'algorithme EM; noter l'analogie de situation avec l'exemple des salamandres p.49.

IV.7 Exercices, exemples

IV.7.1 Chaînes de Markov

Exercice IV.7.1.1 (Modèle d'Ehrenfest) Deux chiens ont des puces qui sautent de l'un à l'autre. Il y a en tout m puces. On considère le nombre X_n de puces sur le premier chien entre le n -ième et le $n + 1$ -ième saut (donc $|X_n - X_{n+1}| = 1$). Donner la matrice de transition de la chaîne de Markov X_n . Montrer que sa loi stationnaire est binomiale.

Exercice IV.7.1.2 Un volume contient des particules. Sur chaque intervalle $[n, n + 1[$ chacune meurt avec probabilité p , tandis que d'autres arrivent dont le nombre suit une loi de Poisson de paramètre λ . Soit X_n le nombre de particules à l'instant n ; montrer que la matrice de transition de cette chaîne de Markov est donnée par

$$p(i, j) = e^{-\lambda} \sum_{k=0}^{\min(i, j)} \binom{i}{k} (1-p)^k p^{i-k} \frac{\lambda^{j-k}}{(j-k)!}.$$

Montrer qu'une certaine loi de Poisson est invariante.

Indication : remplacer la borne supérieure de la somme par l'indicatrice $1_{k \leq i} 1_{k \leq j}$.

Exercice IV.7.1.3 Un individu va d'un sommet à un autre d'un graphe sans point isolé en choisissant à chaque instant uniformément parmi les sommets connectés à celui où il se trouve. Vérifier que la chaîne est réversible et donner une mesure invariante. À quelle condition est-elle unique ?

(D'après Foata et Fuchs) Un rat se déplace dans un labyrinthe qui comporte 9 pièces :

²². J. Zhu, J.C. Eickhoff, & P. Yan, "Generalized Linear Latent Variable Models for Repeated Measures of Spatially Correlated Multivariate Data", *Biometrics*, vol 61 pp 874-683, 2005.

²³. Les auteurs considèrent en fait une covariance un peu plus compliquée mais contraignent certaines composantes des β_k

1	2	3
4	5	6
7	8	9

À chaque étape il change de pièce. Lorsqu'il est dans une pièce à k portes, il choisit l'une de ces portes avec probabilité $\frac{1}{k}$. Combien de temps le rat passe-t-il en moyenne dans chaque pièce?

Le graphe est maintenant un triangle de sommets A, B et C. La probabilité initiale de la chaîne (loi de X_0) donne les poids $1/4$, $1/2$ et $1/4$ à A, B et C. Calculer l'espérance de $f(X_3)$, où f est la fonction qui vaut respectivement 0, 1 et 2 en A, B et C (utiliser la formule matricielle).

Exercice IV.7.1.4 (Indécomposabilité et non-apériodicité) On considère la chaîne de Markov du IV.7.1.1.

1. Démontrer l'indécomposabilité.
2. Expliquer pourquoi de manière évidente la chaîne partant d'un état donné ne peut converger vers une mesure invariante (On remarquera que X_n alterne entre deux ensembles disjoints à préciser).
Faire de même avec la chaîne du rat de l'exercice IV.7.1.3.
3. Montrer que de manière générale, lorsqu'il y a un nombre fini d'états, l'existence d'une valeur propre λ pour P équivaut à l'existence d'une fonction f telle que $E[f(X_{n+1})|X_n] = \lambda f(X_n)$. Montrer qu'ici -1 est valeur propre de P . En déduire la non-apériodicité.

Exercice IV.7.1.5 (Réversibilité) Soit (X_0, X_1) les deux premiers échantillons d'une chaîne de Markov à nombre fini d'états. Montrer que si pour une certaine loi initiale π_0 , (X_0, X_1) et (X_1, X_0) ont même loi alors π_0 est invariante et la chaîne est réversible. Cette propriété permet de définir la π_0 -réversibilité si la chaîne n'est pas à nombre fini d'états.

Montrer que ceci implique que pour tout n la loi de X_0, \dots, X_n et la même que celle de X_n, \dots, X_0 (pour un espace d'états arbitraire). On pourra commencer par $n = 2$.

Exercice IV.7.1.6 (Forme produit) On reprend l'exemple du § IV.2. Soient F_1, \dots, F_d , d espaces d'états E_0 une partie de leur produit. Dans l'exemple d est le nombre de cellules $F_i = \{0, 1, \dots, N\}$, et $E_0 = \{(x_1, \dots, x_d) : \sum x_i \leq N\}$. Soit P_k une matrice de transition réversible sur F_k (p.ex. : un individu de la cellule raccroche ou un individu décroche) de mesure invariante π_k ; on se propose de définir une chaîne de Markov sur E_0 de la façon suivante : si $X = (X_1, \dots, X_d)$, on choisit $1 \leq k \leq d$ uniformément puis on choisit x selon $P_k(X_k, \cdot)$; la transition se fait vers $X^{k,x}$ ou X selon que $X^{k,x} \in E_0$ ou non (notation du § IV.2). Vérifier que la matrice de transition globale est réversible et que la mesure invariante est de la forme (IV.2).

***Exercice IV.7.1.7 (Dynamique des épidémies, mesure quasi-invariante²⁴)** Soit une population de N individus. À chaque instant $k \in \mathbb{N}$, il y a I_k individus infectés et $S_k = N - I_k$ individus sains. Le passage de k à $k + 1$ se fait de la façon suivante : les I_k individus infectés sont sains au temps $k + 1$, et chacun des S_k individus a une probabilité p de rencontrer chacun des I_k individus infectés (et contracter l'infection), ces I_k événements étant indépendants. p est le taux de contact infectieux.

1. Calculer la probabilité pour un des S_k individus donné de ne pas avoir contracté la maladie au temps $k + 1$.
2. En déduire que la probabilité de transition de la chaîne de Markov I_k satisfait $p_{00} = 1$ et

$$p_{ij} = C_{N-i}^j (1 - q^i)^j q^{i(N-i-j)} \mathbf{1}_{i+j \leq N}, \quad q = 1 - p.$$

à être nulles ce qui évite une surparamétrisation; de plus les mesures sont répétées à trois moments différents ce qui fait trois fois plus d'observations mais une variable «temps» supplémentaire qui est traitée comme les variables spatiales et ne fait donc que rajouter une dimension.

24. I.M. Longini, "A Chain Binomial Model of Endemicity", *Mathematical Biosciences*, 50, 85-93, 1980.

3. Quelle est la mesure invariante ? (vérifier l'apériodicité et l'indécomposabilité). A-t-on irréductibilité ?

On voit donc que I_k converge toujours vers 0. En simulation on observe que le temps d'atteinte de 0 est quasi-astronomique (pour N un peu grand, par exemple $N = 30$) dès que q passe en dessous d'une certaine limite, tandis que si q est au dessus de cette valeur, I_k tend vers 0 assez vite. Pour étudier ce phénomène on va poser $q = q_0^{1/N}$ et considérer le comportement asymptotique de I_k/N quand N est grand.

4. Démontrer que $E[I_{k+1}|I_k] = (N - I_k)(1 - q^{I_k})$.

5. On pose $x_k = \lim_N I_k/N$ (on suppose que la limite existe en probabilité). En déduire que $x_k = \lim_N E[I_k]/N$ puis que $x_{k+1} = (1 - x_k)(1 - q^{x_k})$.

On montre que si $q_0 e > 1$ alors x_k tend vers 0. En revanche, si $q_0 e < 1$ alors x_k converge vers le point fixe non-nul $x^*(q_0)$ de l'équation précédente, ce qui « montre » que pour une population grande, si $q^N e > 1$, I_k aura tendance à se stabiliser un certain temps autour de la valeur $I^* = Nx^*(q^N)$ avant de tendre vers 0.

On pourra faire une simulation avec par exemple $N = 30$ et q au voisinage de 0,93 ; on vérifiera que la valeur théorique I^* correspond assez bien à la réalité, en revanche, le seuil d'endémie $q = e^{-1/N}$ est assez approximatif. On pourra observer qu'au dessous du seuil d'endémie le spectre de la matrice P contient une valeur propre très proche de 1 associée à un vecteur propre à composantes positives, tracer la mesure quasi-invariante correspondante, et la comparer aux données observées pendant le long transitoire de la simulation.

IV.7.2 Échantillonneur de Gibbs, algorithme de Metropolis

Exercice IV.7.2.8 Proposer un algorithme d'échantillonnage de Gibbs pour simuler des réalisations du vecteur aléatoire de densité

$$f_{XY}(x, y) = C \exp(-y^2/2 - x^2(1 + y + y^2)/2).$$

Exercice IV.7.2.9 Soient X_1, \dots, X_d d v.a. exponentielles de paramètre λ , et S leur somme. Proposer un algorithme d'échantillonnage de Gibbs pour simuler la loi de (X_1, \dots, X_d) conditionnellement à $S > C$.

Exercice IV.7.2.10 (Hard-core lattice gaz model²⁵) On se donne un graphe G à n sommets. Une configuration consiste à affecter à chaque sommet de G une valeur 0 ou 1 de sorte que deux sommets connectés par un arc ne soient pas à 1. On considère la distribution qui donne à une configuration un poids proportionnel à $p^{n_1}(1-p)^{n-n_1}$ où n_1 est le nombre de 1 (c'est donc la loi qui attribue 0 ou 1 avec probabilité $1-p$ et p indépendamment à chaque sommet, conditionnée par l'isolement des 1).

Proposer un échantillonneur de Gibbs pour simuler des réalisations de ce graphe et une méthode pour estimer le nombre moyen de sommets à 1 sous la loi considérée.

Exercice IV.7.2.11 (Modèle de Fortuin-Kasteleyn²⁶) On se donne un graphe G à n arcs. Une configuration $\xi \in \{0, 1\}^n$ consiste à affecter à chaque arc de G une valeur 0 ou 1, une valeur 0 étant considérée comme une annihilation de cet arc, de sorte que ξ représente un sous graphe de G . On donne à ces sous-graphes une distribution

$$P(\xi) = Z^{-1} q^{N(\xi)} \prod_k p^{\xi_k} (1-p)^{(1-\xi_k)}$$

où $N(\xi)$ est le nombre de composantes connexes du sous-graphe.

25. J. van den Berg, J.E. Steif, "Percolation and the hard-core lattice gas model", *Stochastic Process. Appl.* 49, no. 2, 179–197, 1994.

26. G. Grimmett, "The stochastic random-cluster process and the uniqueness of random-cluster measures", *Ann. Probab.* 23, no. 4, 1461–1510, 1995.

Proposer un échantillonneur de Gibbs pour simuler des réalisations de cette loi.

Exercice IV.7.2.12 Simulation de points avec effet répulsif.

1. Proposer un algorithme d'échantillonnage de Gibbs pour générer des familles de d points (z_1, \dots, z_d) de $[0, 1]$, conditionnés par le fait que les z_k sont au moins à distance ε les uns des autres.
2. Combiner cette méthode avec un rejet dans le cas où chaque z_i appartient à $[0, 1]^2$.
3. Proposer une méthode de Métropolis pour générer des familles de d points (z_1, \dots, z_d) avec une densité par rapport à la loi uniforme sur $([0, 1]^2)^d$ proportionnelle à γ^n où n est le nombre de paires de points distants de moins de ε .

Exercice IV.7.2.13 On désire colorier une carte des départements. Un tel coloriage associe à chaque département un vecteur $g_i \in [0, 1]^3$ correspondant aux proportions de rouge, vert et bleu. Comme il faut que deux départements voisins aient des couleurs assez différentes, on se propose de tirer les coloriations avec une probabilité proportionnelle à $\exp(-\beta \sum \|g_i - g_j\|)$ où la somme est étendue seulement aux paires de départements voisins, et β est une constante à choisir, supposée ici connue.

Proposer une méthode de Métropolis pour réaliser ce projet. Proposer également un échantillonneur de Gibbs (on pourra utiliser une méthode de rejet).

Exercice IV.7.2.14 On observe des v.a. $(Y_{ij})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p}$. On suppose l'existence de v.a. $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_p)$, $\xi = (\lambda_y, \mu, \lambda_\theta)$ avec les propriétés de distribution conditionnelle (cf § IV.4.2) :

$$\begin{aligned} Y_{ij} | \theta, \xi &\stackrel{\text{ind}}{\sim} \mathcal{N}(\theta_j, \lambda_y^{-1}) \\ \theta_j | \xi &\stackrel{\text{ind}}{\sim} \mathcal{N}(\mu, \lambda_\theta^{-1}) \\ \mu, \lambda_y, \lambda_\theta &\stackrel{\text{ind}}{\sim} \mathcal{N}(0, 1), \mathcal{E}(1), \mathcal{E}(1) \end{aligned}$$

1. j représente un pays de la communauté européenne dans lequel on a tiré n individus au hasard et Y_{ij} est le logarithme du taux d'imposition de l'individu. Interpréter chaque coordonnée de ξ .
2. Proposer une méthode simple de simulation d'une réalisation de ces v.a.
3. On pose $Y = (Y_{ij})_{ij}$. Écrire la loi de (Y, θ, ξ) . Les Y_{ij} sont-elles indépendantes ?
4. Proposer un échantillonneur de Gibbs pour simuler (θ, ξ) sous sa loi conditionnelle aux Y_{ij} .
5. Proposer une méthode pour calculer l'estimateur bayésien $\hat{\xi}(Y) = E[\xi|Y]$.
6. Proposer une méthode simple de simulation pour estimer la variance de $\hat{\xi}(Y)$ sous la loi de (Y, θ, ξ) .
7. Proposer une méthode de simulation, si ξ est connu, pour estimer la variance $\sigma(\xi)$ de $\hat{\xi}(Y)$ (donc conditionnellement à ξ) ; en déduire un estimateur de $\sigma(\xi)$ à partir seulement des observations Y (Noter l'analogie de démarche avec l'estimateur de variance de \hat{p}_n estimateur usuel de la probabilité qu'une variable de Bernoulli vaille 1). Comparer heuristiquement cet estimateur de variance à celui du point précédent, en particulier dans le cas où l'on a peu de données et dans le cas contraire.

Exercice IV.7.2.15 On s'intéresse à l'évolution de la population des grues blanches d'Amérique, espèce en voie de disparition²⁷. Chaque année est effectué un compte exact de la population de ces grues lorsqu'elles arrivent au Texas au début de l'hiver. On observe à chaque fois deux groupes : les brunes qui ont moins d'un an et les blanches qui sont plus âgées. On dispose de ces données de 1938 à nos jours.

Soit la variable X_{ij} qui contient le nombre de grues de la classe d'âge j pour l'année i (elles sont ici numérotées de 1 à n). On considère en tout 7 classes d'âge, la dernière comprenant toutes les grues de plus de 6 ans. On mesure donc les variables

$$B_i = X_{i1}, \quad W_i = X_{i2} + \dots + X_{i7}, \quad i = 1, \dots, n.$$

27. W.A. Link, J.A. Royle, J.S. Hatfield, "Demographic Analysis from Summaries of an Age-Structured Population", *Biometrics*, 59, 4, 778-785, Dec. 2003.

Ces observations n'interviennent qu'à partir de la question 2. On se donne le modèle suivant pour l'évolution de la population

1. Chaque grue de la classe j , $j < 7$, a une chance φ_{ij} de survivre et donc de passer à la classe $j + 1$ l'année suivante.
2. Chaque grue de la classe 7 donne naissance à un nombre de petits qui suit une loi de Poisson de paramètre λ_i ; elle a ensuite une chance φ_{i6} de survivre et donc de rester dans la classe 7 l'année suivante.

Ce modèle fait clairement du vecteur $X_i \in \mathbb{N}^7$ une chaîne de Markov. $\varphi = (\varphi_{ij})$ et $\lambda = (\lambda_i)$ paramétrisent cette loi.

1. Donner pour chaque j la loi de $X_{i+1,j}$ sachant X_i . Exprimer $P(X_{i+1,1} = x_1, \dots, X_{i+1,7} = x_7 | X_i)$. On notera $p(k; \lambda) = \lambda^k e^{-\lambda} / k!$ et $b(k; n, p) = p^k (1-p)^{n-k} C_n^k$.
2. En déduire la loi $f(X; \varphi, \lambda)$ de $(X_{ij})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq 7}$ (on suppose que l'on se donne une loi μ_0 initiale pour X_1 ; elle n'influencera pas les estimations et les tests). C'est un produit de termes un peu compliqué.
3. Quelle modification simple apporter à f pour obtenir la loi conditionnelle aux observations, à une constante près? Noter qu'il suffit de donner la loi conditionnelle de $(X_{i2}, \dots, X_{i6})_{1 \leq i \leq n}$.
4. Soit $1 < i < n$ (on ne traite pas ici, pour simplifier, les cas $i = 1$ ou $i = n$). On veut simuler (X_{i1}, \dots, X_{i7}) conditionnellement à (B_i, W_i) et aux $X_{i'j}$, $i' \neq i$. Quelles sont les contraintes portant sur les valeurs possibles? En déduire un algorithme de Metropolis permettant cette simulation.
5. En déduire un échantillonneur de Gibbs permettant simuler les X_{ij} conditionnellement aux (B_i, W_i) .

On se donne le modèle hiérarchique suivant

$$\begin{aligned} \varphi_{ij} &= (1 + e^{-\alpha_i - \beta_j})^{-1}, \\ \log(\lambda_i) &= a + bi + \varepsilon_i \end{aligned}$$

où

$$\alpha_i \sim \mathcal{N}(0, \tau_\alpha^{-1}), \quad \beta_j \sim \mathcal{N}(0, 2.5), \quad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \tau_\varepsilon^{-1}), \quad \tau_\alpha, \tau_\varepsilon \sim dx/x, \quad a, b \sim dx$$

(concernant l'usage de « distributions » non intégrables comme loi a priori, voir § IV.4.2, note 9). On s'intéresse aux paramètres $(a, b, \tau_\alpha, \tau_\varepsilon)$, les autres variables $((\alpha_i), (\beta_j), (\varepsilon_i))$ étant considérées comme des effets aléatoires.

6. Exprimer la distribution de $((X_{ij}), (\alpha_i), (\beta_j), (\varepsilon_i), \tau_\alpha, \tau_\varepsilon, a, b)$.
7. Comment simuler des échantillons de $(a, b, \tau_\alpha, \tau_\varepsilon)$ conditionnellement aux X_{ij} ? On ne détaillera pas les lois de tirage mais on expliquera le mécanisme.
8. Comment simuler des échantillons de $(a, b, \tau_\alpha, \tau_\varepsilon)$ conditionnellement aux observations (les B_i et les W_i)?
9. On trouve que les distributions de a et b a posteriori sont approximativement $\mathcal{N}(-1.1, 0.075^2)$ et $\mathcal{N}(-0.018, 0.004^2)$. Qu'en dire?
10. Proposer une méthode d'échantillonnage pour vérifier si l'hypothèse « $\beta_2 = \beta_3 = \beta_4 = \beta_5$ » est raisonnable (plusieurs approches sont possibles, la meilleure étant probablement de commencer par fabriquer une statistique de test).

Exercice IV.7.2.16 On veut simuler sous une loi $\pi(x_1, \dots, x_K)$ conditionnellement à l'appartenance à $E_0 \subset E$, et l'on sait simuler chaque X_k sous π conditionnellement aux autres X_j , $j \neq k$. L'algorithme de Gibbs va demander de simuler y sous $\pi(X_k = y | X_j, j \neq k)$ conditionnellement à $X^{k,y} \in E_0$. Si ce n'est pas faisable directement (E_0 est trop compliqué), on peut faire des tirages de y jusqu'à ce que $X^{k,y} \in E_0$. Cette méthode sera longue s'il se trouve que peu de valeurs de y réalisent cette contrainte. On peut alors proposer l'algorithme suivant qui permet de faire changer k à chaque fois :

1. Tirer k uniformément dans $\{1, \dots, d\}$.
2. Tirer y sous $P(y) = \pi(X_k = y | X_j, j \neq k)$.
3. Si $X^{k,y} \in E_0$, faire $X' = X^{k,y}$ sinon $X' = X$.

Vérifier que la chaîne ainsi construite est bien réversible et que la mesure invariante est bien la bonne.

IV.7.3 Algorithme EM

Exercice IV.7.3.17 On reprend les notations du § IV.4.4. On se propose de montrer la propriété de croissance de l'algorithme EM.

1. Montrer que pour deux densités de probabilité $p(z)$ et $q(z)$ on a $\int (\log q(z) - \log p(z))p(z)dz \leq 0$ (utiliser l'inégalité de Jensen).
2. En déduire que $\log \int p_\theta(Y, z)dz - \log \int p_{\theta_0}(Y, z)dz \geq H(\theta, \theta_0) - H(\theta_0, \theta_0)$, puis, qu'en particulier $p_{\theta_{n+1}}(Y) \geq p_{\theta_n}(Y)$.

Exercice IV.7.3.18 On reprend les notations du § IV.4.4. Soit

$$h(\theta) = \nabla_x H(x, \theta)|_{x=\theta} = \int \nabla \log(p_\theta(Y, z)) p_\theta(z|Y) dz = E_\theta[\nabla \log(p_\theta(Y, z))|Y].$$

L'algorithme EM se propose de résoudre $h(\theta) = 0$. Le but de cet exercice est de proposer un algorithme de Gauss-Newton pour tenter d'accélérer la convergence (malheureusement la propriété de croissance est perdue et la convergence reste à prouver).

1. Montrer que $h(\theta) = \nabla \log p_\theta(Y)$. Un déduire que $\nabla h(\hat{\theta})$ est une matrice symétrique négative. On supposera dans la suite qu'elle est également définie.
2. Montrer que

$$\nabla h(\theta) = E_\theta[\nabla^2 \log p_\theta(Y, z)|Y] + Cov_\theta(\nabla \log p_\theta(Y, z)|Y) = A(\theta) + B(\theta).$$

On pourra vérifier que $A(\theta)$ et $B(\theta)$ ont une expression raisonnablement simple dans le cas du mélange de deux gaussiennes avec p connu considéré au § IV.4.4 (i.e. $\theta = (\alpha, \beta)$).

3. L'algorithme de Gauss-Newton pour résoudre $h(\theta) = 0$ est : $\theta_{n+1} = \theta_n - \nabla h(\theta_n)^{-1} h(\theta_n)$. On pourra vérifier que si $H(\theta, \theta_0)$ est quadratique en (θ, θ_0) cet algorithme converge en une étape, contrairement à l'itération (IV.6).

Justifier l'algorithme

$$\begin{aligned} \theta_{n+1} &= \theta_n - M_n^{-1} h_n(\theta_n) \\ h_n(\theta_n) &= \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K l_{n,k} \\ l_{n,k} &= \nabla \log p_{\theta_n}(Y, z_k) \\ M_n &= \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \nabla^2 \log p_{\theta_n}(Y, z_k) + \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K l_{n,k} l_{n,k}^T - \frac{1}{K^2} \left(\sum_{k=1}^K l_{n,k} \right) \left(\sum_{k=1}^K l_{n,k} \right)^T. \end{aligned}$$

IV.7.4 Processus ponctuels

Exercice IV.7.4.19 Soit X est Poisson d'intensité $\mu(dx)$ sur E , et $p(\xi; x)$ un noyau de proposition (c.f. IV.5.1). Si $\xi \sim p(\xi; x)\mu(d\xi)/\lambda$ et $\eta \sim \mathcal{U}(X)$, un calcul standard sur les processus ponctuels montre que pour f mesurable bornée

$$\lambda E \left[\frac{f(X, \xi)}{p(\xi; X)} \right] = E[|X| f(X \setminus \{\eta\}, \eta)].$$

En déduire la validité de l'algorithme du § IV.5.1.

IV.7.5 Champs de Gibbs

Exercice IV.7.5.20 Soit un champ de Gibbs sur S et $A \subset S$ montrer que la loi conditionnelle de X_A sachant $(X_b)_{b \notin A}$ est de la forme

$$P(X_A | X_b, b \notin A) = Z^{-1} e^{-\sum_{A \cap C \neq \emptyset} V_C(X_C)},$$

où Z ne dépend que des valeurs de X en dehors de A .

Exercice IV.7.5.21 (D'après X. Guyon) On considère le champ de Gibbs binaire sur $S = \{1, \dots, 2n\}$ de loi

$$\pi(x) = Z^{-1} e^{U(x)}, \quad U(x) = \alpha \sum_i x_i + \beta \sum_{i=1}^{2n-1} x_i x_{i+1} + \gamma \sum_{i=1}^{2n-2} x_i x_{i+2}, \quad x_i = \pm 1.$$

1. Quels sont les points voisins d'un point $i \in S$?
2. Soit P (resp. I) l'ensemble des indices pair (resp. impairs). Quelle est la loi de X_I sachant X_P ? Que se passe-t-il si $\gamma = 0$?
3. Désormais $\gamma = 0$. On observe un vecteur $(Y_i)_{i \in P}$ de variables indépendantes conditionnellement à X telles que $P(Y_i = -X_i | X) = 1 - P(Y_i = X_i | X) = \varepsilon$.
 - (a) Montrer qu'on a $P(Y_i | X) = e^{\delta X_i Y_i} / (2 \cosh(\delta))$ pour un δ bien choisi (calculer $P(Y_i | X)$ dans les deux cas $X_i Y_i = 1$ et $X_i Y_i = -1$ et identifier).
 - (b) En déduire la loi de X sachant Y .
 - (c) En déduire une méthode basée sur un échantillonneur de Gibbs pour estimer $E[X|Y]$.

Exercice IV.7.5.22 On reprend l'exemple de la segmentation d'image du § IV.6 dans le cas gaussien. On suppose β connu. Les μ_i et σ ne sont pas connus. Il faut donc les estimer (préalablement à X).

1. En s'inspirant du § IV.4.4, proposer un algorithme pour réaliser cette estimation au maximum de vraisemblance. On explicitera la solution de (IV.7).
2. On suppose que l'on sait réaliser la maximisation de (IV.10) en X (c'est en fait un problème difficile). Proposer un algorithme itératif, moins rigoureux, pour estimer simultanément X , les μ_i et σ .

Exercice IV.7.5.23 Vérifier la formule (IV.13).

Exercice IV.7.5.24 On s'intéresse à modifier le modèle binomial du § IV.6.4.

1. Trouver une loi de probabilité satisfaisant la contrainte (loi de Poisson tronquée) :

$$P(X_a = k | X_b, b \neq a) = Z_a^{-1} \frac{\lambda_a^k}{k!} \mathbf{1}_{k \leq n_a}, \quad \lambda_a = e^{\alpha + \sum_b c_{ab} X_b}.$$

Z_a est la constante de normalisation.

2. Même question avec cette fois le modèle de Poisson :

$$P(X_a = k | X_b, b \neq a) = e^{-\lambda_a} \frac{\lambda_a^k}{k!}, \quad \lambda_a = e^{\alpha + \sum_b c_{ab} X_b}.$$

Pourquoi est-il nécessaire ici que $c_{ab} \leq 0$ pour tous a et b ? (Commencer par étudier le cas où il n'y a que 2 sites $S = \{a, b\}$).

V

MODÈLES MARKOVIENS

V.1 Généralités

Les chaînes de Markov à état discret ou scalaire peuvent toujours se mettre sous la forme

$$X_n = Q(X_{n-1}, U_n), \quad U_n \sim \mathcal{U}([0, 1]) \tag{V.1}$$

où $Q(x, u)$ est la fonction quantile de la loi de X_n sachant X_{n-1} :

$$Q(x, u) = \min\{y : P(X_n \leq y | X_{n-1} = x) \geq u\}.$$

C'est la méthode d'inversion pour générer X_n connaissant sa loi, cf § I.3.2. Si le processus est non-stationnaire, Q va dépendre de n .

En pratique, la méthode d'inversion est inutile car les chaînes ont naturellement la forme (V.1), avec cependant U non-uniforme. Par exemple pour simuler un processus GARCH on utilisera directement des variables gaussiennes :

$$X_n = \sum_{k=1}^p a_k X_{n-k} + \varepsilon_n \sigma_n + \sum_{k=1}^p b_k \varepsilon_{n-k} \sigma_{n-k},$$
$$\sigma_n^2 = s + \sum_{k=1}^p c_k \sigma_{n-k}^2 + \sum_{k=0}^p d_k \varepsilon_{n-k}^2.$$

Les ε_n sont des $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes, et σ_n^2 représente donc la variance de l'erreur de prédiction de X_n sachant le passé. Ici $(X_n, \dots, X_{n-p+1}, \sigma_n, \dots, \sigma_{n-p+1}, \varepsilon_n, \dots, \varepsilon_{n-p+1})$ est une chaîne de Markov. Ces modèles sont utilisés en finance pour représenter des processus dont la variance est changeante (« volatility clustering ») et les queues de distribution élevées. Ils permettent également de fournir des exemples de processus décorrélés dépendants (p.ex. accroissement journalier du logarithme d'un cours boursier).

Les exercices du § V.6.3 présentent d'autres exemples de processus autorégressifs.

Le reste du chapitre est consacré au traitement de situations plus compliquées.

V.2 Simulation des processus de saut

Les processus de Poisson sont des processus croissants à valeurs sur les entiers successifs, et donc constants par morceaux. Un tel processus N_t est donc caractérisé simplement par les instants où il saute. Un saut représentera l'arrivée d'un événement (arrivée d'un client,...).

Processus de Poisson à intensité constante. Pour un tel processus, les interarrivées (intervalle de temps entre deux sauts successifs) sont les v.a. $\mathcal{E}(\lambda)$. Il suffit donc de simuler une suite i.i.d $\tau_n \sim \mathcal{E}(\lambda)$ et les évènements arrivent aux instants $T_k = \sum_{i=1}^k \tau_i$. Donc $N_t = \sup\{k : T_k \leq t\}$.

Il se trouve que ce processus se caractérise par propriété suivante

$$P(N_{t+h} - N_t = 1 | \mathcal{F}_t) = \lambda h + O(h^2)$$

où \mathcal{F}_t est la tribu du passé avant t . On voit bien comment cette propriété suffit en théorie à simuler le processus : discrétiser le temps en intervalles de longueur h très petite et faire un saut à chaque instant nh avec probabilité λh .

Sur un intervalle $[a, b]$ le nombre $N_{a,b}$ de sauts suit la loi $\mathcal{P}(\lambda(b-a))$ et conditionnellement à $N_{a,b}$ les sauts sont uniformément répartis, ce qui donne une autre façon de simuler. De plus $N_{a,b}$ et $N_{c,d}$ sont indépendants si $[a, b] \cap]c, d] = \emptyset$.

PRINCIPE DE SUPERPOSITION. Soient N_t et N'_t deux processus de Poisson, alors leur superposition $N_t + N'_t$ est encore un processus de Poisson de paramètre $\lambda + \lambda'$.

Processus à intensité variable. On a maintenant, pour une certaine fonction λ_t

$$P(\text{un saut sur } [t, t+h] | \mathcal{F}_t) = \lambda_t h + O(h^2). \tag{V.2}$$

Une méthode simple de simulation est d'utiliser que le processus N_t se réécrit également $N_{\Lambda(t)}^0$, où $\Lambda(t) = \int_0^t \lambda_s ds$ et N_t^0 est un processus de Poisson d'intensité 1. Pour une méthode différente de type rejet, voir [39].

$N_{a,b}$ suit ici la loi $\mathcal{P}(\Lambda(b) - \Lambda(a))$ avec cette fois la répartition de densité $\lambda_t / (\Lambda(b) - \Lambda(a))$. La propriété d'indépendance et le principe de superposition restent.

PROCESSUS DE HAWKES. Soit $\mu(t)$ une fonction positive et $\gamma(t)$ une autre fonction positive, nulle sur \mathbb{R}_- et d'intégrale < 1 . Le processus de Hawkes associé est construit de la façon suivante : simuler la première génération qui est un processus d'intensité μ . Partant de chaque évènement T_i de première génération, simuler ses enfants comme un processus de Poisson d'intensité $\gamma(t - T_i)$ (ce sont donc des évènements postérieurs à T_i). Simuler ensuite la troisième génération de manière analogue en partant de chaque évènement de la seconde, et continuer jusqu'à extinction des familles (ce qui arrive car $\int \gamma(t) dt < 1$: Le nombre d'enfants d'une génération est d'espérance $\nu = \int \gamma$ et l'on montre facilement que le nombre de descendants d'un parent donné est d'espérance $1 + \nu + \nu^2 \dots = 1/(1 - \nu)$).

PROCESSUS À INTENSITÉ STOCHASTIQUE. Il arrive que l'intensité λ_s dans (V.2) dépende du passé de la trajectoire avant s . Il est remarquable que si λ est de la forme $\lambda_t = \mu(t) + \sum_{T_i \leq t} \gamma(t - T_i)$ on retrouve le processus de Hawkes présenté ci-dessus¹. Des modèles de ce type sont utilisés pour les tremblements de terre (secousse initiale puis répliques)², avec par exemple $\gamma(x) = a + b(x+c)^{-p}$, $\mu = cste$. Ou encore³ $\lambda_s = \psi(\eta t - N_t)$ où ψ est une fonction croissante > 0 .

La simulation peut se faire par une sorte de méthode de rejet si l'on sait que λ est borné par une constante M connue : Il suffit de simuler un processus de Poisson T_n d'intensité M puis successivement pour chaque n , simuler une variable $U_n \sim \mathcal{U}([0, M])$ et ne garder T_n que si U_n est inférieur à l'intensité λ_{T_n} en T_n calculée

1. Théorème de Hawkes et Oakes, voir leur article de 1984.

2. Y. Ogata, K. Katsura, M. Tanemura (2003), "Modelling heterogeneous space-time occurrences of earthquakes and its residual analysis", *J.R.S.S. series C*, 52 (4), 499-509.

3. Y. Ogata, D. Vere-Jones, "Inference for earthquake models : a self-correcting model", *Stochastic Process. Appl.* 17 (1984), no. 2, 337-347.

Un application très différente concernant les parasites du pin est étudiée dans : J.G. Rasmussen, J. Møller, B.H. Aukema, K.F. Raffa, J. Zhu, "Bayesian inference for multivariate point processes observed at sparsely distributed times", 2006, www.math.aau.dk/~jm/ipscont-techreport.pdf.

sur la base du passé de la nouvelle trajectoire. On vérifie facilement que (V.2) est satisfait. Voir [39] pour un raffinement.

Un processus à sauts markoviens est caractérisé par sa matrice de taux de transition $A = (A_{ij})$ d'un état à l'autre. Sa caractérisation «infinésimale» est :

$$P(X_{t+h} = j | \mathcal{F}_t) = P(X_{t+h} = j | X_t) = A_{ij}h + O(h^2), \quad X_t = i \neq j. \quad (\text{V.3})$$

Comme précédemment on pourrait simuler approximativement ainsi : discrétiser le temps en intervalles de longueur h très petite et à chaque instant nh faire un saut vers un point j différent de $i = X_{nh-h}$ avec probabilité $A_{ij}h$ et rester en i avec probabilité $1 - \sum_{j \neq i} A_{ij}h$.

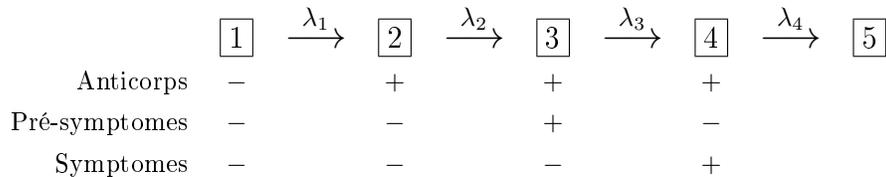
On peut simuler ce processus comme suit : soit $X(t) = i$ l'état courant, pour chaque état $j \neq i$ on simule une variable exponentielle de paramètre A_{ij} et l'on fait la transition correspondant au minimum m de ces variables. On a alors l'état à l'instant $X(t+m)$, et $X(s) = X(t)$ pour $s \in [t, t+m[$.

Il est plus simple d'utiliser la propriété suivante : On vérifie que partant de i , j est choisi avec probabilité $Q_{ij} = A_{ij} / \sum_{k \neq i} A_{ik}$. Si l'on fait abstraction du temps, l'évolution peut donc se faire par une chaîne de Markov (chaîne induite). Le temps qu'on reste dans chaque état peut être simulé ensuite, sa loi est une v.a. exponentielle indépendante du reste et de paramètre $\sum_{j \neq i} A_{ij}$, si l'état est i .

La matrice $P_t = (P(X_t = j | X_0 = i))_{ij}$ satisfait $P_t = e^{tA}$, avec $A_{ii} = -\sum_{j \neq i} A_{ij}$. La (ou les) mesure invariante (commune à tous les P_t) satisfait $\pi A = 0$.

Attention : π n'a pas de raison d'être une mesure invariante pour Q car π_i prend également en compte le temps qu'on reste dans l'état i ; en revanche $\pi_i A_{ii}$ est mesure invariante pour Q (vérifier!).

Exemple 1 : Évolution du SIDA. Les auteurs⁴ considèrent un modèle à 5 états («Infecté sans anticorps», «avec anticorps sans symptômes», «avec premiers symptômes», «état cliniquement avancé», «mort») :



À partir d'une étude portant sur 513 individus, les auteurs obtiennent les estimées suivantes des paramètres λ_i en mois⁻¹ : 0.46, 0.02, 0.016, 0.04.

Exemple 2 : Dynamique des épidémies : modèle SIS. Soit une population de taille n . Chaque individu est soit sain soit infecté. Chaque individu infecté guérit indépendamment du reste en un temps de paramètre α (α is the reciprocal of the mean infectious period) et chaque individu sain est infecté en un temps de paramètre proportionnel au nombre i_t d'infectés $\beta i_t/n$; β est appelé «taux de contact infectieux». Il y a donc 2^n états et $2n$ transitions possibles. Ce modèle est résumé par le tableau de gauche

transition	taux	transition	taux
infecté \rightarrow sain	α	$i \rightarrow i - 1$	$i\alpha$
sain \rightarrow infecté	$i\beta/n$	$i \rightarrow i + 1$	$\beta i(n - i)/n$

On vérifie facilement que la relation (V.3) est satisfaite par i_t qui est donc lui-même un processus à sauts Markoviens dont les taux sont données par le tableau de droite; on peut le vérifier plus rigoureusement en passant par la chaîne induite et en exploitant qu'un minimum de v.a.i.i.d. exponentielles est encore

4. Longini, Clark, Byers, Ward, Darrow, Lemp, Hethcote, "Statistical analysis of the stages of HIV infection using a Markov model", Stat Med. 1989 July 8(7), pp 831-843.

exponentiel. Il n'y a plus que $n + 1$ états et 2 transitions possibles à chaque fois. Le passage de α à $i\alpha$ illustre que le min de i v.a.i.i.d. $\mathcal{E}(\alpha)$ est $\mathcal{E}(i\alpha)$.

Des valeurs raisonnables pour la grippe sont $\alpha = 0,36$ par jour (un sujet atteint reste infectieux pendant environ 3 jours) et $\beta = 0,96$ par jour⁵. Voir aussi le modèle SIR de l'exercice V.6.2.8.

Exemple 3 : Dynamique des populations. On considère M populations (états voisins) et l'on note Y_i l'effectif de la i -ième population, $Y = (Y_1, \dots, Y_M)$, $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots)$. L'état est Y et l'on se donne $2M + M(M - 1)/2$ transitions possibles suivantes⁶ :

transition	taux	
$Y \rightarrow Y + e_i$	$Y_i b$	b : taux de naissance,
$Y \rightarrow Y - e_i$	$Y_i d + \gamma Y_i (1 - \rho)$	d : taux de décès,
$Y \rightarrow Y - e_i + e_j$	$\gamma \rho Y_i / (M - 1)$	γ : taux d'émigration ρ : fraction d'émigrants restant dans la communauté.

La division par $M - 1$ vient de ce que le taux d'immigration mélange tous les pays de destination ; le taux d'immigration de i vers j est $\rho\gamma/(M - 1)$. Si l'on utilise la méthode de la chaîne induite, le temps exponentiel à simuler à chaque transition aura pour paramètre $Y_i(b + d + \gamma)$.

Exemple 4 : Réaction chimique. On considère un composé de $n = ([A], [B], [C])$ molécules de A , B et C par litre avec la réaction



Posons $e = (-1, -1, 1)$, alors, si k_1 et k_2 sont les constantes de vitesse des deux réactions :

transition	taux
$n \rightarrow n + e$	$k_1[A][B]$
$n \rightarrow n - e$	$k_2[C]$

ÉQUATION DIFFÉRENTIELLE LIMITE. En utilisant ces équations et (V.3) il vient

$$E[n(t + dt) - n(t)|n(t)] = k_1[A]_t[B]_t dt - k_2[C]_t dt.$$

Si l'on considère que pour n grand, la loi des grands nombres va impliquer que $[X] \simeq E([X])$, $X = A, B, C$, on retrouve alors les équations de la cinétique chimique

$$\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = -\frac{d[C]}{dt} = -k_1[A][B] + k_2[C].$$

V.3 Simulation de processus à événements discrets

La simulation va calculer l'état du système à *chaque instant d'évènement*, ce qui suffit à avoir l'état sur tout le temps puisque rien ne se passe entre deux évènements. Pour la simulation, l'état sera augmenté de façon à rendre markovien le système échantillonné aux instants d'évènements, et à faciliter la simulation ; il

5. A. Lavenu, A.-J. Valleron, F. Carrat, "Exploring cross-protection between influenza strains by an epidemiological model", *Virus Research* 103 (2004).

Sur un plan plus général concernant ces modèles, on pourra consulter le rapport de V. Isham, "Stochastic models for epidemics", 2004. www.ucl.ac.uk/statistics/research/pdfs/rr263.pdf

6. F. Arrigoni, "Deterministic approximation of a stochastic metapopulation model" *Adv. Appl. Prob.*, vol 35, No 3, 691-720, 2003.

contiendra typiquement les informations suivantes :

$$\text{État} \left\{ \begin{array}{l} \text{nombre d'individus dans chacune des parties du système} \\ \text{temps absolu (date du dernier évènement)} \\ \text{instants d'évènements à venir initialisés dans le passé} \\ \text{autres informations sur le passé du système} \end{array} \right.$$

La dernière catégorie contient toutes les variables supplémentaires nécessaires à la simulation des évènements (par exemple si un temps de service dépend du temps écoulé depuis la dernière maintenance, ce dernier devra être propagé dans la simulation). Un évènement à venir initialisé dans le passé est typiquement la livraison d'une commande déjà passée.

Le choix de l'état contient une part d'arbitraire; par exemple si l'on simule la superposition de deux processus de Poisson on peut simuler directement ce nouveau processus de Poisson ou préférer pour d'autres raisons simuler les deux et les superposer ensuite.

Il peut arriver que le nombre de variables à prendre en compte dans l'état ne puisse pas être réduit à un nombre fini donné à l'avance. C'est par exemple le cas si les clients d'une file d'attente s'impatientent et partent si leur service n'a pas commencé après un temps T : les temps de départ potentiel des clients faisant la queue devront être inclus dans l'état.

De plus certaines variables doivent être récupérées en cours de simulation pour évaluer les statistiques requises.

Gestion d'inventaire. Ce problème est caractérisé par les points suivants

- ▶ Politique de gestion des stocks
 - (a) Renouvellement : soit S la quantité de marchandise en stock, alors dès que $S < s_-$, on achète $s_+ - S$ au prix de $c_m(s_+ - S)$. Le délai de la livraison est d_l . Cet achat est payable à la livraison.
 - (b) Inventaire : Les coûts d'inventaire sont de c_i par unité de temps et de marchandise.
- ▶ Dynamique des clients : ils arrivent avec un taux λ pour acheter $\min(Q, S)$ de marchandise au prix unitaire p . Q est une v.a. de loi \mathcal{Q} . La transaction est instantannée.

On pourrait aussi tenir compte de la détérioration des stocks... Le problème concret qui peut se poser est par exemple l'optimisation de s_- , qui doit être assez petit pour éviter trop de commandes et assez grand pour éviter que trop de clients ne partent en achetant moins de marchandise que prévu. On a la structure suivante

$$\text{Évènements} \left\{ \begin{array}{l} \text{arrivée d'un client} \\ \text{arrivée d'une livraison} \\ \text{passage d'une commande (coïncide avec l'arrivée d'un client)} \end{array} \right.$$

$$\text{État} \left\{ \begin{array}{l} S = \text{volume du stock} \\ C = \text{volume de la commande en cours} \\ t = \text{temps absolu} \\ \tau_L = \text{instant d'arrivée de la prochaine livraison (+}\infty \text{ si } C = 0) \\ \tau_A = \text{instant d'arrivée du prochain client} \end{array} \right.$$

On s'intéressera également à la variable B représentant le bénéfice. La simulation du nouvel état $X' = (S', C', t', \tau'_L, \tau'_A)$ et de B' se fait selon deux cas :

- si $\tau_A < \tau_L$, on simule la transaction et l'instant d'arrivée du suivant :

$$t' = \tau_A, \quad Q \sim \mathcal{Q}, \quad S' = S - \min(Q, S), \quad \tau'_A \sim \mathcal{E}(\lambda) + t'$$

et l'on passe une commande en cas de baisse excessive des stocks :

$$\begin{aligned} \text{si } S' < s_- \text{ et } C = 0 : C' = s_+ - S', \quad \tau'_L = t' + d_l \\ \text{sinon } : C' = C, \quad \tau'_L = \tau_L \end{aligned}$$

puis l'évolution du bénéfice :

$$B' = B + \min(Q, S)p - (t' - t)Sc_i.$$

- si $\tau_L < \tau_A$, on a : $X' = (S + C, 0, \tau_L, +\infty, \tau_A)$, $B' = B - c_m(C) - (t' - t)Sc_i$.

Nous renvoyons à [39] pour des discussions plus approfondies sur ce sujet.

V.4 Modèles spatiaux dynamiques

Il s'agit d'un processus à sauts markoviens qui vit sur une grille S (partie finie de \mathbb{Z}^2 , ou n'importe quelle partie finie de l'espace euclidien, ou éventuellement un domaine plus général), et évolue en fonction de ses voisins avec une dynamique de processus de saut.

Compétition entre espèces. Le plan est discrétisé en «sites» où 3 états sont possibles selon ce qui y pousse : herbe, buisson, arbre. Le processus $X(t)$ décrit à chaque instant l'état dans lequel se trouve chaque site : $X_a(t) \in \mathcal{X}$, $a \in S$, où S est l'ensemble des points et \mathcal{X} est l'ensemble à trois éléments (états). Il y a cinq transitions correspondant à la naissance ou la mort d'un buisson ou d'un arbre :

0 : herbe	transition	0 → 1	0 → 2	1 → 0	1 → 2	2 → 0
1 : buisson	taux	$\lambda_1 n_{ij}(1)$	$\lambda_2 n_{ij}(2)$	λ_3	$\lambda_4 n_{ij}(2)$	λ_5
2 : arbre						

$n_{ij}(1)$ est bien entendu le nombre de buissons dans les sites voisins de (i, j) . Ici le nombre de transitions possibles partant d'un état est $2n_0 + 2n_1 + n_2$ où n_i est le nombre de sites dans l'état i . Ce type de modèle s'étend immédiatement à davantage d'espèces, et peut faire apparaître des comportements très différents selon les valeurs des paramètres (disparitions d'espèces, coexistence, oscillations...) ⁷.

ASPECTS PRATIQUES. La mesure invariante de ce processus (et de la chaîne associée) est clairement celle où il n'y a que de l'herbe; c'est la situation vers laquelle converge $X(t)$.

Pour un certain domaine de valeurs de λ , cette convergence peut être très lente si la grille est grande; on peut expliquer cela théoriquement par le fait que la chaîne de Markov correspondante admet des « **mesures quasi-invariantes** » (i.e. qui satisfont $\|\mu P - \mu\| \ll 1$), sur lesquelles la chaîne peut s'installer longtemps; ces mesures sont intéressantes car elles représentent des situations typiques avant désertification ⁸. Voir l'exercice IV.7.1.7 pour des compléments sur ce type de phénomènes.

Si l'on s'intéresse à simuler ces situations typiques (pour différents λ ...) il faut soit arrêter la simulation à temps, soit se mettre en régime stationnaire après avoir modifié les règles du jeu par exemple en autorisant des transitions vers 1 ou 2 bien que les voisins soient à 0, ou en maintenant autour de la grille une certaine proportion d'individus à 1 ou 2.

Catalyse. S représente maintenant la surface d'un catalyseur. L'air ambiant contient du monoxyde de carbone CO et de l'oxygène O₂. Le catalyseur transformera le CO en CO₂ au travers des trois transitions suivantes ⁹ :

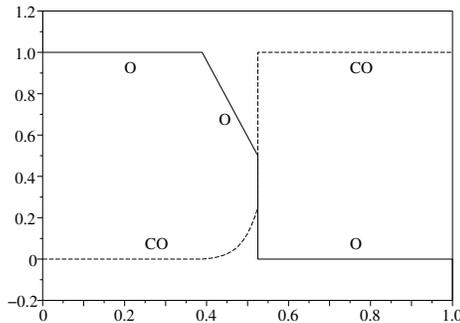
7. D. Tilman, "Competition and bio-diversity in spatially structured habits", *Ecology*, 75, 2-16, 1994.

8. Généralement ces mesures correspondent à des mesures invariantes pour une grille infinie, au sens où, lorsque la la taille de la grille tend vers l'infini, $\|\mu P - \mu\|$ tend vers 0 et μ converge en un sens adéquat vers une certaine mesure.

9. M. Bramson, C. Neuhauser, "Coexistence for a catalytic surface reaction model", *Ann. Appl. Prob.*, Vol 7, No 3, 565-614, 1997.

1. Une molécule de CO atterit sur un site libre
2. Une molécule d'O₂ arrive sur deux sites libres voisins et se scinde en deux avec un atome par site
3. Une molécule de CO et un atome d'oxygène se trouvant sur deux sites voisins reagissent formant une molécule de CO₂ qui s'échappe.

Chacune de ces transitions se fait avec son propre taux. Dans l'article original de Ziff, Gulari et Barshad (1986) la dernière transition est instantannée (taux infini), et p désigne $\lambda_1/(\lambda_1 + \lambda_2)$ (λ_1 et λ_2 sont les taux des deux transitions restantes). p peut s'interpréter comme la proportion de CO dans le mélange ambiant CO/O₂. Ils ont obtenu par simulation les résultats de la figure ci-dessous pour les concentrations de CO et d'O sur la surface en régime stationnaire (mesure quasi-invariantes quand le nombre de sites est grand). Ils mettent en évidence trois régimes :



CONCENTRATIONS EN FONCTION DE p

$p \in [0, p_1[$: empoisonnement à l'oxygène
 $p \in]p_1, p_2[$: coexistence
 $p \in]p_2, 1]$: empoisonnement au CO
 $p_1 \simeq 0,389$ et $p_2 \simeq 0,525$.

V.5 Modèles semi-markoviens, modèles d'état

Un processus semi-markovien est un processus Y_n pour lequel il existe une chaîne de Markov Z_n et une fonction f tels qu'à chaque instant n , $Y_n = f(Z_n)$.

En pratique, la modélisation naturelle est $Y_n = f(X_n, W_n)$ où W_n est une suite i.i.d indépendante du reste, et X_n (l'état) une chaîne de Markov ; alors $Z_n = (X_n, Y_n)$ est une chaîne de Markov et Y_n est donc semi-markovien. D'où la représentation générale usuelle

$$\begin{array}{ccccccc}
 \cdots & X_{n-1} & \longrightarrow & X_n & \longrightarrow & X_{n+1} & \cdots \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & \\
 & Y_{n-1} & & Y_n & & Y_{n+1} &
 \end{array}$$

où chaque flèche représente un tirage selon une loi qui ne dépend que du point d'origine. Dans les applications, les Y_n sont les observations et (X_n) est une trajectoire inconnue que l'on cherche à reconstituer.

Il se peut, comme dans l'exemple de l'exercice IV.7.2.15 que Y_n soit une fonction de X_n : dans cette application $X_n \in \mathbb{N}^7$ et $Y_n = (X_{n1}, X_{n2} + \dots + X_{n7})$.

V.5.1 Modèles linéaires

Les modèles semi-markoviens les plus classiques sont les modèles linéaires.

$$X_{n+1} = AX_n + V_n \tag{V.4}$$

$$Y_n = CX_n + W_n \tag{V.5}$$

où (V_n, W_n) est une suite indépendante, généralement gaussienne de loi connue. A et C sont des matrices connues (ou à estimer...) de dimensions adéquates. Considérons par exemple le problème du suivi d'un avion par un radar (ou un missile...); on note x_n et \dot{x}_n la position et la vitesse de l'avion à l'instant n , et Y_n la

mesure de position prise par le radar. On supposera (en absence d'autre information...) que la vitesse varie lentement de manière inconnue, ce qui conduit au modèle

$$x_{n+1} = x_n + h\dot{x}_n + u_n$$

$$\dot{x}_{n+1} = \dot{x}_n + v_n$$

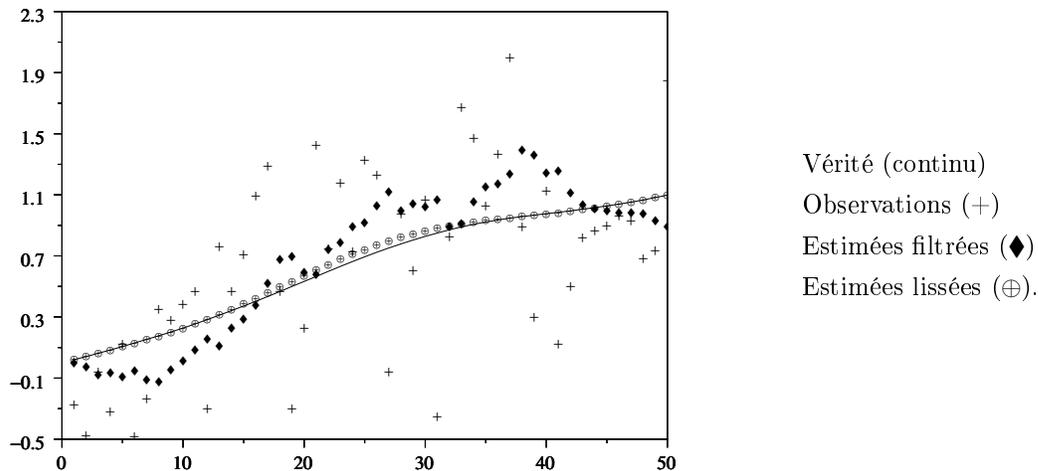
$$Y_n = x_n + W_n$$

où h est le pas de temps. Ici $X_n = (x_n, \dot{x}_n)$ est de dimension 6. Le bruit u_n a une variance σ_u^2 certainement très faible, d'ordre h^4 , puisque la première équation est réalisée à $O(h^2)$ près; on pourrait le prendre nul (ce que l'on fera dans l'exemple suivant); de même v_n a une variance d'ordre $O(h^2)$. Pour avoir un modèle stable, on peut préférer remplacer la deuxième équation par $\dot{x}_{n+1} = \alpha\dot{x}_n + v_n$ avec $0 < \alpha < 1$, il se trouve que cela n'est pas très important pour l'application (estimation de l'état). Notons qu'avec une équation de plus (voir plus bas), on peut réaliser un modèle analogue, mais avec accélération « constante » (en moyenne).

Le but est d'estimer au mieux la position x_n au vu des Y_i , $i \leq n$, seulement. Le filtre de Kalman donne une solution simple à ce problème, qui correspond à postuler une loi gaussienne pour $V_n = (u_n, v_n)$ et pour X_0 , et à calculer à chaque instant $\hat{X}_n = E[X_n|Y_1, \dots, Y_n]$. Ces estimées sont appelées les estimées filtrées, et se calculent par un système d'équations classique (Annexe A). Cette méthode permet de débruiter les Y_i en introduisant l'information que la vitesse varie peu. Mentionnons simplement que \hat{x}_n est la dernière coordonnée de la suite qui maximise la vraisemblance jusqu'au temps n (pour simplifier l'équation qui suit on se place en dimension 1 et l'on suppose les bruits indépendants; on postule une loi $\mathcal{N}(\bar{x}_0, \sigma_0^2)$ pour x_0)

$$\hat{x} = \arg \min_{x_1, \dots, x_n, \dot{x}_1, \dots, \dot{x}_n} \frac{(x_0 - \bar{x}_0)^2}{\sigma_0^2} + \sum_{k=1}^n \frac{(x_k - x_{k-1} + h\dot{x}_{k-1})^2}{\sigma_u^2} + \frac{(\dot{x}_k - \dot{x}_{k-1})^2}{\sigma_v^2} + \frac{(Y_k - x_k)^2}{\sigma_W^2}.$$

Chaque terme peut s'interpréter comme un écart au modèle idéal (bruits nuls), avec une certaine pondération. Comme le filtre de Kalman calcule également la variance de X_n sachant Y_1, \dots, Y_n , il fournit en fait la loi (gaussienne) de X_n sachant Y_1, \dots, Y_n .



Si l'on observe sur un temps N , on peut également calculer les estimées lissées (smoothed) $\check{x}_n = E[x_n|Y_1, \dots, Y_N]$ qui sont meilleures mais arrivent avec retard. La figure ci-dessus illustre le filtre de Kalman et le lisseur. On

a pris le modèle à accélération « constante » (en dimension 1 pour simplifier)

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n + h\dot{x}_n \\ \dot{x}_{n+1} &= \dot{x}_n + h\ddot{x}_n \\ \ddot{x}_{n+1} &= \ddot{x}_n + v_n \\ Y_n &= x_n + W_n, \quad h = 0.04, \sigma_v^2 = 0.5, \sigma_W^2 = 0.4, X_0 = (x_0, \dot{x}_0, \ddot{x}_0) = (0, 0.5, 0.5).\end{aligned}$$

Nous renvoyons à des exposés classiques sur le filtrage linéaire pour plus d'information. Mentionnons également qu'il est dans une certaine mesure possible d'estimer les matrices A et C à partir d'un échantillon Y_1, \dots, Y_n .

V.5.2 Modèles non-linéaires. Filtrage particulaire

On suppose cette fois que X_n est une chaîne de Markov de noyau de transition $Q(x, dx')$, et que Y_n a une certaine loi (« loi d'émission ») sachant l'état X_n que l'on notera $R(x, dy)$.

$$\begin{array}{ccccccc} \cdots & X_{n-1} & \xrightarrow{Q} & X_n & \xrightarrow{Q} & X_{n+1} & \cdots \\ & \downarrow R & & \downarrow R & & \downarrow R & \\ & Y_{n-1} & & Y_n & & Y_{n+1} & \end{array}$$

Si X_n a un espace d'états fini \mathcal{X} , on parle souvent d'un « Modèle à source markovienne cachée » ou d'un « Modèle de Markov caché » (Hidden Markov Model, HMM) ; il sera paramétré par la matrice de transition de X_n et par les densités (souvent supposées gaussiennes) $R(x, dy)$, $x \in \mathcal{X}$; on a donc un nombre fini de paramètres (au moins dans le cas gaussien). Tant que la taille de \mathcal{X} reste raisonnable, tout est assez bien maîtrisé en théorie comme en pratique, puisque depuis maintenant longtemps on dispose de **méthodes de filtrage** donnant la loi de l'état sachant les observations, et également de méthodes d'**estimation des paramètres** des modèles à partir des observations seulement [37, 43, 15]. C'est pour cela qu'une des solutions couramment proposée pour traiter le cas non-linéaire est de discrétiser l'espace d'états, ce qui d'un point de vue pratique est souvent difficile à réaliser.

EXEMPLE 1 : CHANGEMENTS DE RÉGIME¹⁰. On observe le nombre Y_n de crises d'épilepsie d'un patient par jour sur une année (n est donc le jour). Les données laissent supposer deux régimes différents, un avec beaucoup de crises et un avec des crises rares. Un modèle de Markov caché naturel consiste à postuler l'existence d'une chaîne de Markov X_n à deux états non-observée, représentant le régime, et pour Y_n se donner une loi de Poisson de moyenne λ_i si $X_n = i$. Le modèle possède 4 paramètres indépendants : les deux probabilités de transition p_{11} et p_{22} (qui caractérisent la loi du temps pendant lequel le patient reste dans chaque état), et les deux moyennes λ_1 et λ_2 . Tous ces paramètres peuvent être estimés par des algorithmes (dans l'esprit de § IV.4.3 et § IV.4.4), et leur valeur permet de caractériser plus précisément la maladie. Le filtrage estimera la suite des états.

EXEMPLE 2 : MODIFICATION DU MODÈLE LINÉAIRE. Dans (V.4), par exemple si l'on remplace AX_n par $f(X_n)$ il n'existe pas de solution générale satisfaisante au problème de filtrage. C'est également le cas si l'on reprend cette fois le modèle à vitesse (ou accélération) constante mais cette fois en dimension deux (poursuite d'un sous-marin...) et qu'au lieu d'observer la position $x_n = (x_n^1, x_n^2)$, on n'observe que l'angle, soit $Y_n = \arctan(x_n^2/x_n^1) + W_n$.

EXEMPLE 3 : CHANGEMENTS DE MOYENNE¹¹. Au cours d'un forage pétrolier, il est très important de détecter les changements de roche traversée afin d'ajuster la pression du forage. On se donne le modèle

10. N.D. Le, B.G. Leroux, M.M. Puterman, "Exact likelihood evaluation in a Markov mixture model for time series of seizure counts", *Biometrics*, 48, 317-323, 1992.

11. J. Carpenter, P. Clifford, P. Fearnhead, "Building Robust Simulation-based Filters for Evolving Data Sets", Tech. Rep., Dept. Statist., Univ. Oxford, Oxford, U.K., 1999.

suivant pour les observations (« réponse magnétique nucléaire ») :

$$X_{n+1} = \begin{cases} X_n & \text{avec probabilité } p \\ V_n & \text{avec probabilité } 1 - p \end{cases}$$

$$Y_n = X_n + W_n$$

(V_n, W_n) est une suite gaussienne. Les sauts dans la suite X_n représentent un changement de roche.

EXEMPLE 4 : CHANGEMENTS DE DYNAMIQUE¹². La variable Y_n est l'intensité du vent et X_n est une chaîne de Markov prenant trois valeurs correspondant à trois situations météorologiques typiques dans le Golfe de Gascogne (anticyclone des Açores,...). Y_n suit une loi AR- Γ d'ordre 1 (exercice V.6.3.9) dont les coefficients dépendent de X_n . Comme la loi de Y_n dépend également de Y_{n-1}, \dots, Y_{n-p} , il s'agit d'un modèle d'état à condition de rajouter $(Y_{n-1}, \dots, Y_{n-p})$ à l'état.

EXEMPLE 5 : POPULATION DES GRUES BLANCHES D'AMÉRIQUE. Ce modèle est présenté à l'exercice IV.7.2.15; l'observation est $Y_n = (B_n, W_n)$. On y voit comment l'estimation peut se faire, dans un cadre bayésien, par une méthode d'échantillonneur de Gibbs, dans le même esprit qu'au §IV.4.2, la structure markovienne n'intervenant pas particulièrement, si ce n'est qu'elle permet d'écrire la vraisemblance¹³.

Filtrage particulière. On va estimer la loi μ_n de X_n sachant Y_1, \dots, Y_n par une méthode de simulation générale. Il s'agit donc d'échantillonnage postérieur, ce qui peut être appliqué à l'estimation des paramètres du modèle (cf § IV.4.3 et § IV.4.4). Commençons par le cas discret pour simplifier les notations; Q et R sont donc des matrices et μ_n est codé par un vecteur ligne dont chaque coefficient dépend de Y_1, \dots, Y_n . Si l'on note μ_n^- la loi de X_n sachant Y_1, \dots, Y_{n-1} , une simple application de la formule de Bayes conduit aux relations :

$$\text{Prédiction : } \mu_n^- = \mu_{n-1} Q$$

$$\text{Correction : } \mu_n = \mu_n^- \cdot R(., Y_n)$$

où l'on a noté

$$(a \cdot b)_i = \frac{a_i b_i}{\sum_j a_j b_j}.$$

Le passage de μ_{n-1} à μ_n^- correspond à une étape de chaîne de Markov et fait diffuser la mesure tandis que le passage de μ_n^- à μ_n correspond à l'introduction de l'observation et a un effet de concentration. Si l'on est en continu, ces formules deviennent pour les densités par rapport à la mesure de référence $m(dx)$ (Lebesgue...)

$$\mu_n^-(x) = \int \mu_{n-1}(y) Q(x, y) m(dy)$$

$$\mu_n(x) = \mu_n^-(x) \cdot R(x, Y_n), \quad (a \cdot b)(x) = \frac{a(x)b(x)}{\int a(x)b(x)m(dx)}.$$

La valeur initiale μ_0 doit être spécifiée (loi a priori de x_0). La propagation de ces équations est en pratique impossible à réaliser exactement (sauf dans le cas linéaire où c'est le filtre de Kalman et dans le cas discret fini). La méthode particulière consiste à approximer μ_n par une distribution de particules, c.-à-d. une somme de masses Dirac (de manière analogue la distribution au temps n de multiples répliques indépendantes d'une chaîne de Markov représente « bien » sa loi instantannée). La mesure μ_n sera approchée par

$$\int f(x) \mu_n(x) m(dx) \simeq \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I f(\xi_n^i)$$

12. P. Ailliot & al, "Simulation of sea state parameters process to study the profitability of a maritime line", *Proc. ISOPE Conf.*, vol. III, pp. 51-57, 2003

13. Pour un autre exemple intéressant de H.M.M. avec utilisation de l'échantillonneur de Gibbs pour l'estimation : M.C.M. de Gunst, H.R. Künsch, J.G. Schouten., "Statistical analysis of ion channel data using hidden markov models with correlated state-dependent noise and filtering", *J.A.S.A.*, Vol. 96, No. 455, pp. 805-815, Sept. 2001.

Le passage de μ_{n-1} à μ_n^- se fera simplement par une transition de Markov (donc par simulation) partant de chaque ξ_{n-1}^i , on obtient alors un ensemble ξ_{n-} , et le passage de μ_n^- à μ_n se fait par tirage de particules dans l'ensemble précédent selon la loi sur $\{1, \dots, I\}$ proportionnelle à $r_i = R(\xi_{n-}^i, Y_n)$

$$\xi_{n-1} \xrightarrow{Q} \xi_{n-} \xrightarrow{R(\cdot, Y_n)} \xi_n.$$

Il est plus précis et moins coûteux de réaliser la dernière étape de manière déterministe en remplaçant chaque particule ξ_{n-}^i par $\nu_i = [I\rho_i]$, $\rho_i = r_i / \sum_j r_j$, exemplaires d'elle-même; comme cette méthode modifie légèrement le nombre total de particules, on préférera faire comme suit

34 - ALGORITHME Tirage des I particules au temps n .

1. Pour chaque particule ξ_{n-1}^i , tirer $\xi_{n-}^i \sim Q(\xi_{n-1}^i, y)m(dy)$
2. Calculer les vraisemblances $r_i = R(\xi_{n-}^i, Y_n)$, $\rho_i = r_i / \sum_j r_j$, $s_i = \sum_{j=1}^i \rho_j$, $s_0 = 0$.
3. Remplacer ξ_{n-}^i par ν_i exemplaires d'elle-même, où ν_i est le nombre d'entiers dans l'intervalle $(Is_{i-1} + 0.5, Is_i + 0.5]$ (différence des parties entières des bornes).

On voit en particulier qu'avec cette méthode le rééchantillonnage est sans effet si R est constant. Avant le calcul des ρ_i on peut permuer aléatoirement les particules ce qui permet de ne pas prendre en compte leur arrangement (qui n'intervient que dans la mesure où ν_i diffère de $[I\rho_i]$).

Rien n'interdit de tirer ξ_{n-} sous une loi différente quitte à compenser ensuite, comme lors d'un échantillonnage préférentiel

$$\xi_{n-1} \xrightarrow{Q_n} \xi_{n-} \xrightarrow{R_n} \xi_n, \quad R_n(\xi_{n-}^i) = R(\xi_{n-}^i, Y_n)Q(\xi_{n-1}^i, \xi_{n-}^i)/Q_n(\xi_{n-}^i)$$

la loi Q_n pouvant dépendre du passé de la simulation et des observations. Un bon choix est $Q_n(x) \propto R(x, Y_n)Q(\xi_{n-1}^i, x)$ [1]; si R est borné, on peut envisager de réaliser cela avec une méthode de rejet basée sur Q ($C = \int R(y, Y_n)Q(\xi_{n-1}^i, y)m(dy) / \max_x R(x, Y_n)$, cf § I.3.4).

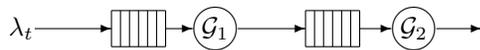
On trouvera des compléments dans [3, 28, 1] et des applications tout-à-fait intéressantes sur le site www.cs.washington.edu/ai/Mobile_Robotics/projects.

LISSAGE TRAJECTORIEL. Pour estimer la loi de X_0, \dots, X_n sachant Y_1, \dots, Y_n , on peut faire le même raisonnement que précédemment mais en considérant l'état $X'_i = (X_0, \dots, X_i)$. Cela se traduit dans l'algorithme précédent simplement par le fait que la particule ξ_n^i sera désormais liée à son passé $(\xi_0^i, \dots, \xi_{n-1}^i)$ et que le rééchantillonnage se fera sur les trajectoires complètes (si bien qu'au bout d'un certain temps, à force d'élimination par rééchantillonnage, les premiers états seront les mêmes pour tous).

V.6 Exercices

V.6.1 Processus à évènements discrets

Exercice V.6.1.1 Soit la file à deux serveurs en série

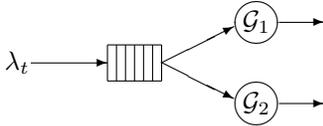


On désigne par système 1 « la première file d'attente et le premier serveur », et le système 2 est défini de manière analogue. Les clients arrivent en entrée du premier système selon un processus de Poisson d'intensité λ puis se font servir par le premier serveur, le service étant aléatoire de distribution \mathcal{G}_1 puis refont éventuellement la queue et se font servir par le deuxième serveur (distribution \mathcal{G}_2).

Montrer qu'on peut simuler la file en considérant l'état suivant

$$\text{État} \begin{cases} N_1, N_2 = \text{nombre de clients dans les deux systèmes} \\ t = \text{temps absolu} \\ \tau_1, \tau_2 = \text{instant de fin du service en cours de chaque serveur} \\ \tau_A = \text{instant d'arrivée du prochain client} \end{cases}$$

Exercice V.6.1.2 On considère une file à deux serveurs en parallèle :



Le client en tête de file occupe le premier serveur qui se libère, et le serveur 1 si les deux sont libres. Quel état choisira-t-on ? Expliciter le schéma de simulation.

Exercice V.6.1.3 Un patient reçoit des injections à des instants t_i espacés selon une certaine loi gamma. À chaque fois, la dose injectée x_i suit une loi log-normale ; la quantité de produit actif résiduelle dans le corps à t due à la i -ième injection sera $x_i e^{-\alpha(t-t_i)}$ (amortissement exponentiel).

Proposer une méthode pour simuler la quantité de produit actif dans le corps du patient aux instants d'injection, en tirant profit de la forme de l'amortissement pour simuler avec un état de dimension 1.

Exercice V.6.1.4 On considère une file d'attente à serveur unique. Montrer la relation exprimant l'attente W_i du i -ième client à celle du précédent, au temps de service du précédent S_{i-1} et à l'inter-arrivée A_i :

$$W_i = (W_{i-1} + S_{i-1} - A_i)_+, \quad W_0 = 0.$$

On pourra faire un schéma où l'on dispose les événements d'intérêt sur l'axe des temps.

Exercice V.6.1.5 [39] Un atelier possède $m + n$ machines identiques et n'en utilise que n simultanément au plus. Un employé est chargé de la réparation des machines en panne. On se donnera une loi pour la durée de réparation et une autre pour la durée de vie d'une machine remise à neuf.

Proposer un algorithme de simulation avec un état de dimension $n + 2$.

Exercice V.6.1.6 Expliciter le schéma de simulation de l'exemple du pompiste du § II.4.3.

V.6.2 Processus de saut.

Exercice V.6.2.7 On reprend l'exercice IV.7.1.1. On s'intéresse désormais au processus Y_t désignant le nombre de puces dans la première boîte au temps t . On rappelle qu'on avait trouvé

$$P(X_{n+1} = i - 1 | X_n = i) = i/m = 1 - P(X_{n+1} = i + 1 | X_n = i).$$

On suppose que chaque puce fait ses sauts en des instants poissonniens de même paramètre λ . Montrer que Y_t est un processus à sauts markoviens dont on donnera la matrice A_{ij} (utiliser le modèle par chaîne de Markov induite).

Exercice V.6.2.8 Soit le modèle SIR (Susceptible, Infectious, Recovered/Resistant)

transition	taux
$(S, I, R) \rightarrow (S - 1, I + 1, R)$	$\beta SI/n$
$(S, I, R) \rightarrow (S, I - 1, R + 1)$	αI
$(S, I, R) \rightarrow (S + 1, I, R - 1)$	λR

Montrer que si l'on suppose que par un effet de loi des grands nombres, à population élevée, I_t/n et S_t/n sont proches de leur espérance on trouve les équations du modèle SIR déterministe pour ces quantités (on garde abusivement la même notation) :

$$\begin{aligned}\dot{I} &= \beta SI - \alpha I, \\ \dot{S} &= -\beta SI + \lambda R, \\ \dot{R} &= \alpha I - \lambda R.\end{aligned}$$

Que peut-on dire si $\beta/\alpha < 1$? Le facteur $R_0 = \beta/\alpha$ est estimé entre 2 et 5 pour le SIDA, 3 et 5 pour la variole, 16 et 18 pour la rougeole¹⁴.

V.6.3 Modèles autorégressifs

Exercice V.6.3.9 (Suite de l'exemple 4 page 74) Soit le processus Y_t tel que, conditionnellement au passé $(\dots, Y_{t-2}, Y_{t-1},)$ Y_t suit la loi gamma de moyenne $\mu_t = \sum_{i=1}^p a_i Y_{t-i} + b$ et de variance σ^2 . Les paramètres sont donc $(p, a_1, \dots, a_p, b, \sigma^2)$. On rappelle que la loi gamma de paramètre α et β admet pour densité $\beta^{-\alpha} \Gamma(\alpha)^{-1} e^{-y/\beta} y^{\alpha-1} 1_{y>0}$, avec pour moyenne et variance $\mu = \alpha\beta$ et $\sigma^2 = \beta^2\alpha$. Expliciter la densité de Y_t sachant le passé.

REMARQUE : AUTORÉGRESSIF CIRCULAIRE. Si Y_t permet de modéliser l'intensité du vent, on peut également modéliser sa direction φ_t par une sorte de processus autorégressif : Breckling¹⁵ propose le modèle markovien suivant pour φ_t : sa loi conditionnelle à $(\varphi_{t-1}, \varphi_{t-2}, \dots)$ suit une distribution de von Mises¹⁶ $M(\mu_t, \kappa_t)$ avec

$$\kappa_t e^{i\mu_t} = a_1 e^{i\varphi_{t-1}} + \dots + a_p e^{i\varphi_{t-p}} + \zeta$$

ζ est un complexe fixe ; les paramètres sont donc $(p, a_1, \dots, a_p, \zeta)$.

14. M. Keeling, "The mathematics of diseases", *Plus Magazine*, No 14, 2001, plus.maths.org/issue14. Voir aussi www.maths.warwick.ac.uk/~keeling/Pop_Dyn.

15. G. BRECKLING, *The analysis of directionnal time series : applications to wind speed and direction*, Lecture Notes in Statistics 61, Springer, 1989.

16. La distribution de Von-Mises de paramètres (μ, κ) , $M(\mu, \kappa)$, est la distribution sur $[0, 2\pi]$ de densité $(2\pi I_0(\kappa))^{-1} e^{\kappa \cos(\varphi - \mu)}$, où $I_0(x)$ est la fonction de Bessel d'ordre 0. On a $E[e^{i\varphi}] = I_1(\kappa) e^{i\mu} / I_0(\kappa)$; κ est un paramètre de concentration. C'est la mesure invariante de l'EDS $d\varphi_t = -\frac{1}{2} \kappa \sigma^2 \sin(\varphi_t - \mu) dt + \sigma dw_t$, pour tout choix de σ .

Pour la simulation, voir : D.J. Best, N.I. Fisher, "Efficient Simulation of the von Mises Distribution", *Applied Statistics*, Vol. 28, No. 2, 1979, pp. 152-157.

VI

SIMULATION DE PROCESSUS : CONVERGENCE

On s'intéresse au problème général suivant :

On sait simuler une chaîne de Markov, que l'on suppose indécomposable et apériodique, et l'on veut estimer la moyenne d'une certaine fonction g sous la mesure invariante : $\theta = E_\pi[g(X_n)]$.

Rappelons les deux points importants déjà mentionnés :

- ▶ on ne simule plus des variables indépendantes
- ▶ les variables n'ont pas la loi π dès le début ; il y a seulement convergence.

Le premier point introduit de la variance supplémentaire dans les estimateurs tandis que le second introduit du biais. Le théorème 22 garantit que ce biais décroît avec vitesse exponentielle ; cependant lorsque l'espace d'états est très grand il arrive souvent que dans la formule (IV.1) $|\lambda_2|$ soit très proche de 1 et C très grand. La méthode simple consistant à simuler une trajectoire X_n et à poser

$$\hat{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(X_n)$$

devra être améliorée. Le problème posé dans toute sa généralité est donc difficile, en particulier celui de l'estimation de la variance d'estimation. L'espoir est généralement que $|\lambda_2|$ ne soit pas trop proche de 1 ou que C soit raisonnablement petit, mais encore faut-il être capable de mettre cette propriété à profit.

VI.1 Algorithme des répétitions

Une méthode pour avoir une estimation de la variance d'estimation est de tirer plusieurs trajectoires indépendamment dans le même esprit que l'algorithme du § III.7

35 - ALGORITHME

1. Choisir une mesure initiale π_0 , le nombre de répétitions R et la longueur des trajectoires N
2. Simuler R trajectoires de longueur N , X_n^r avec loi initiale π_0
3. $\hat{\theta}_r = N^{-1} \sum_n g(X_n^r)$, $\hat{\theta} = R^{-1} \sum_r \hat{\theta}_r$
4. $\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = R^{-2} \sum_r (\hat{\theta}_r - \hat{\theta})^2$.

La validité de la méthode ne pose pas de problème. Le véritable ennui est que *le biais reste inconnu* (même s'il est asymptotiquement nul) et donc l'erreur sur θ est inconnue. En particulier N doit être choisi assez grand de sorte à oublier les conditions initiales et réduire le biais.

Choix de π_0 . Il sera bon de prendre pour π_0 une mesure assez proche de π si possible pour diminuer le biais et de support assez grand pour être sûr de ne pas faire une mesure trop locale si la chaîne communique mal ; dans ce dernier cas, même si la valeur de $\widehat{\sigma}(\widehat{\theta})$ n'est pas très précise pour des R modestes, elle donnera un ordre de grandeur correct pourvu que π_0 soit bien choisi.

Choix de R . Il semble a priori inutile de prendre R trop grand ; à moins de partir de $\pi_0 = \pi$, on peut montrer qu'on a intérêt à investir dans des trajectoires longues plutôt que dans des répétitions, voir [16] § 6.6.

Élimination du transitoire. On peut choisir de ne pas introduire les variables dès le début de simulation en raison de la lenteur de convergence vers la mesure initiale. Ce retard de convergence arrivera typiquement si l'on part par malchance d'une zone transiente, mais sur laquelle on reste avec très grande probabilité. On élimine donc une période transitoire dite « période d'échauffement » de longueur d à déterminer.

Il n'y a pas de réponse générale satisfaisante à la question du choix du meilleur d . On ne peut en effet estimer le temps d'échauffement qu'à condition d'avoir fait une expérience au moins aussi longue que celui-ci ! Tout ceci reste donc très expérimental.

VI.2 Régénération

VI.2.1 Renouvellement

Fixons $i_0 \in E$ et considérons les temps d'atteinte successifs de l'état i_0 , supposé récurrent, pour la chaîne partant de $X_0 = i_0$:

$$T_0 = 0 \\ T_q = \inf(n > T_{q-1} : X_n = i_0).$$

Les instants T_n seront appelés **instants de renouvellement** car les variables à valeurs dans $\cup_d \mathbb{R}^d$

$$Z_q = (X_{T_{q-1}}, \dots, X_{T_q-1})$$

sont i.i.d [7] : leur loi commune est celle de la chaîne partant en i_0 et arrêtée en i_0 . Les variables (S_q, τ_q) définies par

$$S_q = \sum_{n=T_{q-1}}^{T_q-1} g(X_n), \quad \tau_q = T_q - T_{q-1}$$

forment donc une suite i.i.d. Par ailleurs on peut réécrire l'estimateur basé sur les T_Q premières variables :

$$\widehat{\theta} = \frac{Q^{-1} \sum_{n=1}^Q S_q}{Q^{-1} \sum_{n=1}^Q \tau_q} = \frac{\bar{S}}{\bar{\tau}}.$$

Il s'ensuit que

$$\theta = \frac{E[S_1]}{E[\tau_1]}.$$

Le théorème-limite central implique

$$\sqrt{Q} \bar{\tau} (\widehat{\theta} - \theta) = \sqrt{Q} (\bar{S} - \theta \bar{\tau}) \longrightarrow \mathcal{N}(0, s^2), \quad s^2 = \text{Var}(S_1 - \theta \tau_1).$$

Le problème du biais a disparu (un biais existe toujours, mais il est simplement dû au fait que $\hat{\theta}$ est un rapport de variables aléatoires, ce qui n'a que des conséquences secondaires) et l'on a l'estimée de la variance :

$$\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = \frac{1}{\bar{\tau}^2 Q^2} \sum_q (S_q - \tau_q \hat{\theta})^2 = \frac{1}{T_Q^2} \sum_q (S_q - \tau_q \hat{\theta})^2. \quad (\text{VI.1})$$

Cette méthode, malheureusement rarement applicable, est donc infiniment supérieure à la précédente. Si l'on compte que s est au plus de l'ordre de $\bar{\tau}$, on obtient un écart-type au pire de l'ordre de $Q^{-1/2}$; il peut être bien plus petit car la variance de $S_1 - \theta\tau_1$ dépend aussi de g et de la nature de la chaîne. En vertu du théorème qui suit, le nombre de variables simulées sera quant à lui de l'ordre de Q/π_{i_0} , et l'on a donc intérêt à partir d'un point de forte mesure invariante. Noter que si l'on arrive à avoir Q de l'ordre de quelques unités, les estimées de variance sont déjà raisonnables.

36 - THÉORÈME

Soit X_n une chaîne de Markov à valeurs dans un espace dénombrable, de mesure invariante unique π , et T_i le premier instant d'atteinte de l'état i , alors

$$E[T_i | X_0 = i] = \pi_i^{-1}.$$

Pour la démonstration, voir [7] § 6.9.

VI.2.2 Théorie générale

La propriété d'indépendance des trajectoires partielles, et donc l'applicabilité de la formule (VI.1), s'étend à d'autres situations.

37 - THÉORÈME

Soit X_n une chaîne de Markov homogène, T_1 un temps d'arrêt fini avec probabilité 1 et f la fonction telle que $T_1 = f(X_1, X_2, \dots)$. Soit $(T_q)_{q \geq 1}$ la suite croissante de temps d'arrêt, définie par

$$T_{q+1} = f(X_{T_q+1}, X_{T_q+2}, \dots).$$

Si l'on a la propriété de régénération :

$$P(X_n = x | T_1 = n, X_{n-1}, X_{n-2}, \dots) = \varphi(x)$$

pour une certaine fonction φ , alors les variables

$$Z_q = (X_{T_{q-1}}, \dots, X_{T_q-1}) \quad (\text{VI.2})$$

sont i.i.d.

Démonstration: Notons $X_n^+ = (X_i)_{i \geq n}$ et $X_n^- = (X_i)_{0 \leq i \leq n}$. En vertu de la formule de Bayes, puis de la propriété de Markov, on a

$$\begin{aligned} & P(X_n = x, X_{n+1}^+ \in B | T_q = n, X_{n-1}^-) \\ &= P(X_{n+1}^+ \in B | X_n = x, T_q = n, X_{n-1}^-) P(X_n = x | T_q = n, X_{n-1}^-) \\ &= P(X_{n+1}^+ \in B | X_n = x) \varphi(x) \end{aligned}$$

qui ne dépend ni de n ni de X_{n-1}^- ; par conséquent pour tout C

$$P(X_n^+ \in C | T_q = n, X_{n-1}^-) = \psi(C)$$

pour une certaine mesure ψ . Comme sur $\{T_q = n\}$, Z_{q+1} est une fonction du futur après X_n , il s'ensuit que

$$P(Z_{q+1} \in A | T_q = n, X_{T_q-1}^-) = \psi_1(A)$$

pour une certaine mesure ψ_1 qui est nécessairement la loi de Z_{q+1} . Par conséquent comme Z_q^- est mesurable par rapport à $X_{T_q-1}^-$:

$$P(Z_{q+1} \in A | Z_q^-) = \psi_1(A)$$

ce qui prouve la stationnarité et l'indépendance. ■

Dans le cas discret, le premier temps d'atteinte d'un point est un instant de régénération. Nous allons présenter au § VI.2.3 et § VI.2.4 deux méthodes qui permettent de créer davantage d'instantants de régénération.

VI.2.3 Méthode atomique

C'est la méthode classique de [35]. Les instantants de renouvellement peuvent être rares si l'espace est grand ; si un groupe de points I satisfait $p_{ij} = p_{i_0j}$ pour tout $i \in I$ et tout j , alors il est facile de voir que les instantants d'entrée dans I sont encore des instantants de renouvellement. Si l'on met en évidence un groupe de points d'où les transitions sont similaires, on peut encore fabriquer des instantants de régénération, c'est l'objet de ce paragraphe.

Supposons qu'il existe une mesure de probabilité μ sur E et une suite $q_i \geq 0$ non identiquement nulle, telles que pour tous $i, j \in E$

$$q_i \mu_j \leq p_{ij}. \tag{VI.3}$$

On dit que (q, μ) est un atome pour p (la situation $q_i = \delta_{i_0i}$, $\mu_j = p_{i_0j}$, correspond au § VI.2.1). C'est-à-dire que lorsqu'on est à l'état i , la loi du suivant est minorée par μ avec un facteur q_i . Notons que s'il y avait égalité pour tout i , alors $q_i = 1$ et la chaîne de Markov serait une suite de variables indépendantes de loi μ . Plus généralement, on peut remarquer que

$$\begin{aligned} P(X_n = j | X_{n-1} = i) &= q_i \mu_j + (1 - q_i) \frac{p_{ij} - q_i \mu_j}{1 - q_i} \\ &= q_i \mu_j + (1 - q_i) \check{p}_{ij}. \end{aligned} \tag{VI.4}$$

Le membre de droite peut être vu comme un mélange de deux lois avec poids q_i et $1 - q_i$. Ceci signifie que pour simuler la chaîne sachant $X_{n-1} = i$, on peut simuler une variable U_n valant 1 ou 0 avec probabilité q_i et $1 - q_i$ et selon cette valeur tirer X_n sous la loi μ ou bien avec la transition \check{p}_{ij} . La paire (X_n, U_n) est markovienne et chaque instant où $U_n = 1$ est un instant de régénération (la démonstration est laissée au lecteur).

En pratique on préfère procéder sans toucher au mode de simulation de X_n . On simule d'abord X_n , puis U_n sous sa loi conditionnelle à $X_n, X_{n-1}, \dots, X_0, U_{n-1}, \dots, U_0$; on trouve avec la formule de Bayes :

$$P(U_n = 1 | X_n = j, X_{n-1} = i, \dots, X_0) = q_i \mu_j / p_{ij} \tag{VI.5}$$

ce qui permet de produire U_n . D'où la procédure complète

38 - ALGORITHME

1. Choisir q et μ satisfaisant (VI.3)
2. $U_0 = 1$; simuler X_0 sous μ
3. Simuler les X_n , et les U_n selon (VI.5)
4. Calculer les instantants de renouvellement : $T_q = \inf(n > T_{q-1} : U_n = 1)$, $T_0 = 0$
5. $\hat{\theta} = T_Q^{-1} \sum_{n=1}^{T_Q} g(X_n)$, $\hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = T_Q^{-2} \sum_q (S_q - \tau_q \hat{\theta})^2$.

Remarques : Si le nombre d'états est fini, on trouve des conditions simples sur q pour avoir, avec probabilité 1, un nombre infini d'instants de régénération.

Si l'on pose $I = \{i : q_i > 0\}$ et $J = \{j : \mu_j > 0\}$, on voit que tout point de I peut faire une transition vers tout point de J avec probabilité non-nulle; ceci montre tout de suite les limitations de la méthode et donne une première idée sur la construction de q et μ .

La situation idéale pour appliquer ce résultat est de connaître un gros ensemble I et une mesure μ tels que pour $i \in I$ la transition se fasse avec une loi toujours proche de $\mu : p_{ij} \simeq \mu_j$. Dans ce cas on prend $q_i = \min_j p_{ij}/\mu_j$ qui sera souvent proche de 1 pour $i \in I$ et les passages dans I réaliseront souvent un renouvellement. Si μ est une masse de Dirac, on est dans la situation du § VI.2.1.

Il peut être plus facile d'appliquer cette méthode à la chaîne sous-échantillonnée de matrice de transition P^n (à la limite $n = +\infty$, on a $q = 1$ et $\mu = \pi$).

Cas continu.

La relation (VI.3) devient $P(x, dy) \geq q(x)\mu(dy)$ pour une fonction $q \geq 0$ non identiquement nulle et μ une probabilité. Le membre de droite de (VI.5) devient $q(x)\mu(dy)/P(x, dy)$.

Cette relation est à mettre en rapport avec la condition : *Il existe $m > 0$, une fonction $q \geq 0$ non identiquement nulle et μ une probabilité, tels que pour tout x , $P^m(x, dy) \geq q(x)\mu(dy)$* , condition qui intervient dans la définition des chaînes de Harris et qui est couramment vérifiée. La méthode classique de régénération ne pourra s'appliquer que si $m = 1$, ce qui est assez contraignant.

EXEMPLE. La chaîne est une suite (X_n, Y_n) à valeurs dans le plan, où à chaque instant c'est X_n ou bien Y_n (avec $p_t = 1/2$) qui est renouvelé par une v.a. indépendante $\mathcal{N}(0, 1)$. On a bien $m = 2$ et pas 1.

Atome uniforme.

Dans le cas où $\varepsilon = \min_i q_i > 0$, il existe des méthodes de simulation d'échantillons indépendants sous π qui pour chaque échantillon demandent de simuler la chaîne sur une longueur d'ordre $1/\varepsilon$ (exercices VI.5.2 et VI.5.3).

Algorithme de Metropolis.

On reprend les notations du § IV.3. Soit (q, μ) un atome pour P , alors (\check{q}, μ) , avec

$$\check{q}_i = \frac{c\mu_i}{f_i}, \quad c = \min_{\mu_i \neq 0} \frac{f_i q_i}{\mu_i}$$

est un atome pour \check{P} , matrice de transition de (X_n) . La démonstration est laissée en exercice.

Un cas intéressant est celui où $p_{ij} = p_j$ ne dépend que de j ; c'est-à-dire que la chaîne de Markov P produit une suite de v.a.i.i.d. Dans ce cas $q_i = 1$ et $\mu_j = p_j$, $c = \min f_j/p_j$ et le membre de droite de (VI.5) vaut $c \min \left(\frac{f_i}{p_i}, \frac{f_j}{p_j} \right)^{-1}$.

VI.2.4 Modification de la transition

On décrit directement la méthode en espace continu, et toutes les mesures seront données par leur densité par rapport à une mesure de référence $\mu(dx)$, de sorte que les notations sont les mêmes que dans le cas discret.

Brockwell et Kadane¹ proposent une modification de la chaîne de Markov de noyau $p(x, y)$ qui ne change pas la mesure invariante $\pi(x)$ et qui fait apparaître des instants de régénération. Soit $\varphi(x)$ une densité a priori

1. A.E. Brockwell, J.B. Kadane, *Practical Regeneration for Markov Chain Monte Carlo Simulation*, Rap. Techn. 757 du Dept of Stat, Univ. Carnegie Mellon, 2001.

pas trop éloignée de $\pi(x)$, mais sous laquelle on sait simuler facilement. On sait que π est proportionnelle à une fonction f et l'on se donne un réel positif β .

39 - ALGORITHME Tirage de X_{n+1}

1. Tirer $Y \sim p(X_n, y)\mu(dy)$ et poser $\alpha = \min\left(1, \frac{\beta\varphi(Y)}{f(Y)}\right)$
2. Avec probabilité $1 - \alpha$ et α choisir

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y & (1 - \alpha) \\ \sim Z^{-1}\varphi(x) \min(1, \beta^{-1}f(x)/\varphi(x)) & (\alpha) \end{cases}$$

3. Si l'on a choisi la deuxième option, $n + 1$ est un instant de régénération.

Z est la constante de normalisation. L'invariance de π et la propriété de régénération sont laissés en exercice.

Le tirage dans le deuxième cas se fait facilement avec la méthode de rejet en tirant sous la loi φ . La situation idéale est d'avoir $\varphi = \beta^{-1}f$ (ce qui voudrait dire qu'on sait facilement simuler sous π !). On essayera de prendre φ proche de π et par exemple $\beta \simeq E_\varphi[f(X)/\varphi(X)]$. Noter que si β est trop grand, il y aura beaucoup de rejets et si β est trop petit on n'observe pas de renouvellement.

On vérifie facilement que si $\varphi = f/\beta = \pi$ et si l'on a l'atome $p(x, y) \geq q(x)\mu(y)$, alors $E[\alpha|X_{n-1}, X_{n-2}, \dots] \geq q(X_{n-1})$; la méthode fait donc probablement mieux que toute méthode atomique lorsque $\varphi = f/\beta = \pi$.

VI.3 Échantillonnage parfait : couplage sur le passé

Les algorithmes précédents permettent de calculer des moments de π mais ne permettent pas de simuler *exactement* des variables sous π . L'échantillonnage parfait est une méthode plus sophistiquée permettant de réaliser cela. Elle est due à J. Propp et D. Wilson² sur une idée remontant à G. Letac. Elle permet d'échantillonner selon la loi invariante exacte d'une chaîne de la forme

$$X_{n+1} = f(X_n, U_n) \tag{VI.6}$$

où les U_n sont i.i.d. Elle est particulièrement adaptée au cas où la chaîne est stochastiquement monotone, c'est-à-dire que f est une fonction croissante de la première variable (pour une certaine relation d'ordre sur l'espace d'états).

VI.3.1 Cas général

Supposons la chaîne X_n réalisée pour $n \in \mathbb{Z}$. Si l'on note $U_p^q = (U_p, U_{p+1}, \dots, U_q)$, l'équation (VI.6) permet d'exprimer X_0 en fonction de X_{-n} et de U_{-n}^{-1} :

$$X_0 = f(X_{-n}, U_{-n}^{-1}) = \varphi_n(X_{-n}, \omega) \tag{VI.7}$$

$$\varphi_n(x, \omega) = \varphi_{n-1}(f(x, U_{-n}), \omega). \tag{VI.8}$$

La fonction f a été étendue à un nombre d'arguments arbitraire pour opérer plusieurs transitions successives. La fonction φ_n est la même avec une notation plus adéquate pour la suite, où n est le nombre de transitions à effectuer et ω est la suite des U_i . On a donc le schéma suivant pour φ_n

$$X_{-n} = x \xrightarrow{U_{-n}} X_{-n+1} \xrightarrow{U_{-n+1}} X_{-n+2} \dots \xrightarrow{U_{-1}} X_0 = \varphi_n(x, \omega)$$

2. J. Propp, D. Wilson, "Coupling from the Past : a User's Guide", *Microsurveys in discrete probability*, 181-192, DIMACS Ser. Discrete Math. Theoret. Comput. Sci., 41, Amer. Math. Soc., 1998.

40 - THÉORÈME

On considère la chaîne (VI.6) avec les notations (VI.7,VI.8). Soit \hat{x} un point de l'espace. On suppose que $\varphi_n(\hat{x}, \omega)$ converge avec probabilité 1 vers une limite aléatoire Z , et que la chaîne partant de \hat{x} converge vers une certaine loi π (nécessairement invariante), alors Z suit la loi π . Ceci reste vrai si l'on suppose la suite U_n simplement stationnaire.

REMARQUES. En général, $\varphi_n(x, \omega)$ convergera avec probabilité 1 vers une limite aléatoire Z indépendante de x (noter que l'image de cette application ne fait que diminuer d'un n au suivant)³. Ce n'est cependant pas systématiquement le cas, et cette propriété peut dépendre de la fonction f choisie (même si la loi de la chaîne reste la même), voir l'exercice VI.5.6.

Démonstration: On a pour tout A

$$P(Z \in A) = P(\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(\hat{x}, \omega) \in A) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(\varphi_n(\hat{x}, \omega) \in A) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_{\hat{x}}(X_n \in A) = \pi(A)$$

■

L'idée est donc de réaliser φ_n pour des n de plus en plus grands jusqu'à ce que son image soit réduite à un point. Ce point suit la loi π . Ceci va imposer de stocker à chaque itération les valeurs $\varphi_n(x)$, $x \in E$, et l'on obtient l'algorithme suivant difficilement réalisable en pratique

1. Initialisation : Partir $\varphi(x) = x$, $x \in E$.
2. Simuler U indépendante du reste.
3. Recalculer la fonction $\varphi : \forall x \in E, \varphi(x) \leftarrow \varphi(f(x, U))$.
4. Si $\varphi(E)$ est un singleton, cette valeur suit π et c'est fini, sinon aller au 2.

On pourrait être tenté de propager vers le futur au lieu de reculer vers le passé : Simuler les trajectoires partant de toutes les valeurs possibles de X_0 avec la formule (VI.6) et attendre qu'elles se confondent en un seul point, c.-à-d. le premier n tel que $x \rightarrow f(x, U_1^n)$ soit constant. Malheureusement la distribution de ce point ne sera pas π . L'avantage de la propagation directe est que le nombre de points à simuler diminue au cours du temps. Une méthode essayant de mettre cela à profit est la suivante qui consiste à reculer dans le temps par paquets de longueur croissante, p.ex. 2^k , chaque paquet correspondant à une simulation directe, ceci se faisant au prix de reculer plus que nécessaire (deux fois au pire) :

41 - ALGORITHME On pose $\bar{U} = (U_{-n}, \dots, U_{-1})$

1. Initialisation : Partir de $\bar{U} = U_{-1}$
2. Doubler la longueur de \bar{U} en prolongeant cette suite par la gauche avec des variables i.i.d
3. Calculer l'image de E par ces transitions, $f(E, \bar{U})$, en utilisant (VI.6). Si c'est un singleton cette valeur suit π et c'est terminé, sinon retourner au 2.

Le stockage de φ est évité, la mise en œuvre plus simple, mais le nombre de calculs reste en gros le même, tout à fait prohibitif si l'espace d'états est grand.

3. On peut se faire une image de ce qui se passe en travaillant sur le cas d'un AR(1) : $X_{n+1} = aX_n + U_n$, $|a| < 1$; dans ce cas $\varphi_n(x, \omega) = a^n x + a^{n-1}U_{-n} + \dots U_{-1}$. On n'est plus dans un espace d'états fini, mais on voit bien la convergence $\varphi_n(x, \omega)$ vers une limite.

VI.3.2 Cas monotone

On suppose que l'on s'est donné une relation d'ordre partiel \preceq sur E avec un plus petit élément x_{\min} et un plus grand x_{\max} (c.-à-d. $\forall x \in E, x_{\min} \preceq x \preceq x_{\max}$). Si pour tout $u, x \rightarrow f(x, u)$ est croissante, alors $\varphi_n(x, \omega)$ aussi, et $|\varphi_n(E)| = 1$ si et seulement si $\varphi_n(x_{\min}) = \varphi_n(x_{\max})$. L'algorithme consiste alors simplement à calculer ces deux états pour des n de plus en plus grands :

42 - ALGORITHME On pose $\bar{U} = (U_{-n}, \dots, U_{-1})$

1. Initialisation : Partir de $\bar{U} = U_{-1}$
2. Doubler la longueur de \bar{U} en prolongeant cette suite par la gauche avec des variables i.i.d
3. Calculer les deux états terminaux $f(x_{\min}, \bar{U})$ et $f(x_{\max}, \bar{U})$ avec condition initiale x_{\min} et x_{\max} , en utilisant (VI.6). S'il coïncident, cette valeur suit π et c'est terminé, sinon retourner au 2.

Exemple : Champ de Gibbs. Considérons le modèle (IV.9) simulé avec l'algorithme du § IV.6.3, et définissons $x \preceq y$ ssi $x_a \leq y_a$ pour tout a . x_{\min} est le tableau de -1 et x_{\max} est le tableau de 1. La fonction $f(x, u)$ contient le tirage de l'indice de la coordonnée à modifier ($u = (a, v)$, x_a est changé si $v \leq q$, cf (IV.11), et $U \sim \mathcal{U}(S) \otimes \mathcal{U}([0, 1])$); elle est croissante si les β_i sont ≥ 0 .

Exemple : Le modèle de Fortuin-Kasteleyn (exercice IV.7.2.11) est également monotone pour un choix naturel de f si $q \geq 1$.

Exemple : Algorithme de Metropolis. On reprend les notations du § IV.3. Dans le cas où $p_{ij} = p_j$ (tirages indépendants) on a monotonie avec $i \preceq j$ ssi $p_i f_j \leq p_j f_i$ (on choisit un ordre arbitraire en cas d'égalité). Il faut cependant que x_{\min} et x_{\max} soient connus, ce qui n'est pas toujours le cas. Un algorithme qui ne requiert que x_{\min} est proposé au paragraphe suivant.

VI.3.3 Méthode d'encadrement et de domination

La méthode précédente souffre de deux problèmes :

1. Souvent x_{\max} n'existe pas. Par exemple si X_n est un processus ponctuel à valeurs dans l'ensemble des parties finies d'un ensemble S infini, $x_{\min} = \emptyset$ est un choix naturel mais x_{\max} n'existe pas.
2. f n'est pas nécessairement croissante.

Deux idées de Kendall et Møller⁴ permettent de remédier à cela dans des situations réelles. La première est d'introduire un processus majorant réversible qui jouera le rôle de x_{\max} et la deuxième est d'exploiter un encadrement de f par deux fonctions croissantes. On suppose donc toujours que x_{\min} existe.

On supposera que (VI.6) peut se réécrire sous la forme

$$X_{n+1} = g(X_n, \lambda(X_n), U_n). \tag{VI.9}$$

où $\lambda(x)$ est à valeurs dans \mathbb{R}_+^d (on peut généraliser à d'autres ensembles...) et que $g(x, \lambda, u)$ est croissante en x et en λ mais que $\lambda(x)$ est une fonction quelconque. Soient deux fonctions définies pour $x^- \preceq x^+$ satisfaisant coordonnée par coordonnée

$$\lambda^-(x^-, x^+) \leq \min_{x^- \preceq x \preceq x^+} \lambda(x) \tag{VI.10}$$

$$\lambda^+(x^-, x^+) \geq \max_{x^- \preceq x \preceq x^+} \lambda(x) \tag{VI.11}$$

4. J. Møller, "Perfect simulation of conditionally specified models", *J. Roy. Stat. Soc. (B)*, 61, 251-264, 1999. dimacs.rutgers.edu/~dbwilson/exact.html.

W.S. Kendall, J. Møller, "Perfect simulation using dominating processes on ordered spaces, with application to locally stable point processes", *Adv. in Appl. Probab.* 32, no. 3, 844-865, 2000.

qui aient la même monotonie en x^- et x^+ que les membres de droite, et h telle que

$$g(x, \lambda^+(x_{\min}, x), u) \preceq h(x, u).$$

On suppose que de plus :

$$\text{On sait réaliser une suite } D_0, D_{-1}, \dots \text{ telle que } D_{k+1} = h(D_k, U_k).$$

On définit les processus minorant et majorant :

$$\begin{aligned} X_{n,k+1}^- &= g(X_{nk}^-, \lambda^-(X_{nk}^-, X_{nk}^+), U_{-n+k}), & X_{n0}^- &= x_{\min} \\ X_{n,k+1}^+ &= g(X_{nk}^+, \lambda^+(X_{nk}^-, X_{nk}^+), U_{-n+k}), & X_{n0}^+ &= D_{-n}. \end{aligned}$$

Alors on vérifie sans difficulté que

$$X_{n-1,n-1}^- \preceq X_{nn}^- \preceq \varphi_n(x_{\min}, \omega) \preceq X_{nn}^+ \preceq X_{n-1,n-1}^+$$

ce qui implique que dès que $X_{nn}^- = X_{nn}^+$, alors $X_{pp}^- = X_{pp}^+ = \varphi_p(x_{\min}, \omega)$ pour $p > n$ et donc cette valeur suit la loi π .

Noter que si f est croissante, on retrouve l'algorithme du paragraphe précédent sauf que l'on calcule $f(D_{-n}, \bar{U})$ au lieu de $f(x_{\max}, \bar{U})$.

Mise en œuvre. On cherchera d'abord (si f n'est pas croissante) les fonctions g et λ telles que (VI.6) puisse se réécrire (VI.9) avec les conditions de monotonie requises; puis les fonctions λ_- et λ_+ seront typiquement définies comme les membres de droite de (VI.10) et (VI.11).

On cherchera ensuite h telle que D soit réversible et telle que la mesure invariante de D soit facilement réalisable : en effet dans ce cas il suffit de tirer D_0 selon sa loi invariante puis faire reculer la chaîne $D_{k-1} = h(D_k, U_k^0)$ avec une première suite U_k^0 ; la suite D_k a bien la loi désirée en raison de la réversibilité; on tirera ensuite les U_k selon leur loi sachant les D_k , c.-à-d. chaque U_k indépendamment selon sa loi conditionnée par $D_{k+1} = h(D_k, U_k)$.

Il ne reste plus qu'à simuler les $(X_{nk}^-, X_{nk}^+)_{0 \leq k \leq n}$ pour $n = 2, 4, 8, 16, \dots$ jusqu'à ce que $X_{nn}^- = X_{nn}^+$.

Exemple : Champ binomial. La loi du champ binomial du § IV.6.4 est

$$P(X) = Z^{-1} \exp \left(\alpha \sum_a X_a + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} c_{ab} (X_b - qn_b)(X_a - qn_a) \right) \prod_a \frac{1}{X_a! (n_a - X_a)!}$$

On considérera la relation $x \preceq x' \iff \forall a, x_a \leq x'_a$. On peut poser $x_{\min} = (0, \dots, 0)$ et $x_{\max} = (n_a)_a$. Comme X est majoré, on peut prendre $D_n = x_{\max}$.

Soit $b(n, p, v)$ une fonction croissante en p qui fabrique une binomiale $\mathcal{B}(n, p)$ si v suit une loi donnée dont on note V une réalisation (p.ex. $b(n, p, v) = \sum_{i \leq n} 1_{v_i \leq p}$ avec la loi $\mathcal{U}([0, 1]^n)$). Soit W une v.a. de loi uniforme sur l'ensemble des indices où varie a . Alors la méthode de Gibbs consiste à remplacer X_W par $b(n_W, p, V)$ où $p = \lambda_W(X)/(1 + \lambda_W(X))$, et $\lambda_W(X)$ est donné par la formule (IV.15). Ceci définit une fonction $f(x, u) = g(x, \lambda, u)$, $u = (v, w)$, $\lambda(x) = (\lambda_a(x))_{a \in S}$, qui réalise bien l'échantillonneur de Gibbs.

On prendra $\lambda^-(x^-, x^+) = \min_{x^- \preceq x \preceq x^+} \lambda(x)$ où le min est pris coordonnée par coordonnée.

Exemple : Champ poissonnien. La loi du champ poissonnien est (on fait $q = 0$ pour simplifier)

$$P(X) = Z^{-1} \exp \left(\alpha \sum_a X_a + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} c_{ab} X_b X_a \right) \prod_a \frac{1}{X_a!}.$$

Les coefficients c_{ab} sont ≤ 0 (cf exercice IV.7.5.24).

On construira comme précédemment une fonction $p(\lambda, v)$ croissante en λ qui produit une variable de Poisson de paramètre e^λ si v suit une distribution prescrite (p.ex. par la méthode d'inversion). La fonction $f(x, u) = g(x, \lambda(x), u)$, $u = (v, w)$, consiste à modifier x_w par $p(\lambda_w(x), v)$, avec $\lambda_w(x) = \alpha + \sum_b c_{wb} x_b$.

On prendra $\lambda^-(x^-, x^+) = \min_{x^- \preceq x \preceq x^+} \lambda(x)$ où le min est pris coordonnée par coordonnée. $h(x, u) = g(x, \alpha, u)$.

Exemple : Processus ponctuels. Reprenons l'algorithme du §IV.5.1. Les variables simulées ξ et η à chaque étape seront notées ξ_{n+1} et η_{n+1} . On considère le nouvel état $X'_n = (X_n, \xi_n, \eta_n)$ et l'on pose $\lambda = (p_1, 1 - p_2)$, et $X' \preceq Y' \iff X \subset Y$. Alors la méthode de couplage s'applique, si par exemple $q(x \cup \{\xi\})/q(x)$ est bornée dans les deux sens. On prendra pour h la transition où dans p_1 on a remplacé $q(x \cup \{\xi\})/q(x)$ par sa valeur maximale M (quand x et ξ varient) et dans p_2 on remplace $q(x \setminus \{\eta\})/q(x)$ par $1/M$, ce qui correspond au cas $q(x) = M^n$, si bien que dans ce cas la chaîne est encore réversible et sa mesure invariante est un processus de Poisson ponctuel d'intensité $M\mu$.

Exemple : Algorithme de Metropolis. Reprenons l'exemple du §VI.3.2. Ici $\lambda \equiv 0$, les D_k seront i.i.d de loi (p_j) et $U_k = (D_k, V_k)$ où $V_k \sim \mathcal{U}([0, 1]^n)$ est la v.a. servant à réaliser l'étape 2 de l'algorithme par la comparaison $q \leq V_k$ (cf la formule (IV.3)).

VI.4 Réduction de variance

Les méthodes de réduction de variance sont également applicables dans le contexte markovien. L'échantillonnage préférentiel donnera l'algorithme suivant (on note $p_{ij} = p(i, j)$) :

43 - ALGORITHME

1. Simuler les X_n selon la loi markovienne de matrice transition Q
2. Calcul d'une estimée $\hat{\theta}$:

$$\hat{\theta} = d_N N^{-1} \sum_{n=1}^N g(X_n), \quad d_N = \prod_{n=1}^N \frac{p(X_{n-1}, X_n)}{q(X_{n-1}, X_n)}$$

3. Pour estimer la variance, répéter (1) et (2) R fois (cf §VI.1) puis

$$\hat{\theta} = R^{-1} \sum_{r=1}^R \hat{\theta}_r, \quad \hat{\sigma}(\hat{\theta})^2 = R^{-2} \sum_{r=1}^R (\hat{\theta}_r - \hat{\theta})^2.$$

Pour ce qui est de la méthode des variables antithétiques du §III.4, remarquons que la simulation de X_n peut se faire à partir d'une suite i.i.d de variables uniformes U_n , avec une formule $X_n = f(X_{n-1}, U_n)$, si bien que $\hat{\theta}(X_1, \dots, X_N)$ est de la forme $\hat{\theta} = \varphi(U_1, \dots, U_N)$; en simulant $Y_n = f(Y_{n-1}, 1 - U_n)$ on peut donc fabriquer la variable antithétique $\hat{\theta}(Y_1, \dots, Y_N)$, et moyenner les deux estimateurs obtenus (la valeur initiale est issue d'un échauffement qui est le même pour les deux suites : $X_1 = Y_1$).

VI.5 Exercices et compléments

Exercice VI.5.1 (Méthode de Breyer et Roberts⁵) Soit une chaîne de probabilité de transition $p(x, y)$ (on est soit en discret soit en continu, dans ce dernier cas p est une densité). Soit une mesure $\mu(x)$ (en continu μ

5. L.A. Breyer, G.O. Roberts, "A new method for coupling random fields", *LMS Journal of Computation and Mathematics*, 5 : 77-94, 1999.

est une densité) et la chaîne X_n construite en faisant soit une transition selon p soit une transition vers μ :

$$Y_n \sim p(X_{n-1}, \cdot), \quad Z_n \sim \mu(\cdot), \quad \alpha_n = \min \left(1, \frac{p(X_{n-1}, Z_n)\mu(Y_n)}{p(X_{n-1}, Y_n)\mu(Z_n)} \right)$$

$$X_n = \begin{cases} Z_n & \text{avec probabilité } \alpha_n \\ Y_n & \text{avec probabilité } 1 - \alpha_n. \end{cases}$$

1. Montrer que X_n est une chaîne de Markov de probabilité de transition $p(x, y)$.
2. Montrer que les instants où Z_n est choisi sont des instants de régénération.
3. Montrer que si on a l'atome $p(x, y) \geq q(x)\mu(y)$, alors $E[\alpha_n | X_{n-1}, X_{n-2}, \dots] \geq q(X_{n-1})$. En déduire que cette méthode donnera sans doute davantage de renouvellements que la méthode atomique pour cette mesure μ .
4. Montrer pourquoi cette méthode ne peut fonctionner telle quelle dans le cas de l'échantillonneur de Gibbs présenté dans l'encadré du § IV.2 (et généralement de même pour l'algorithme de Metropolis). Comment remédier à cela ?

Exercice VI.5.2 Soit une P matrice de transition possédant un atome (ε, μ) :

$$\varepsilon\mu_j \leq p_{ij}$$

où ε est un réel > 0 . Dans la suite, on note $\mathbf{1}$ le vecteur colonne de 1.

1. Montrer que la décomposition (VI.4) peut se réécrire : $P = \varepsilon\mathbf{1}\mu + (1 - \varepsilon)\check{P}$.
2. En déduire que la mesure invariante de P s'écrit : $\pi = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon(1 - \varepsilon)^i \mu \check{P}^i$
3. En déduire la validité de l'algorithme (Murdoch et Green) :
 - (a) Tirer N selon la loi géométrique de paramètre ε et X_0 selon μ
 - (b) Faire tourner la chaîne \check{P} partant de X_0 jusqu'au temps N . X_N suit la loi π .
4. Étendre cette méthode au cas continu.

Exercice VI.5.3 Soit P , ε et μ comme à l'exercice précédent. On propose ici une méthode qui évite de simuler sous \check{P} .

Expliquer comment on peut appliquer la méthode de couplage par le passé en ne simulant la chaîne que pour un seul état initial (s'inspirer de la méthode atomique).

Expliquer pourquoi le nombre de transitions à simuler sera d'ordre ε^{-1} .

Montrer comment ceci s'étend au cas continu.

Exercice VI.5.4 Montrer que π est bien mesure invariante dans l'algorithme du § VI.2.4.

Exercice VI.5.5 Montrer la monotonie pour l'algorithme de Metropolis annoncée au VI.3.2 (On écrira la chaîne sous la forme $X_{n+1} = f(X_n, (U_n, V_n))$, avec U_n et V_n uniformes sur $[0, 1]$).

Exercice VI.5.6 Il s'agit de montrer l'importance du choix de f pour la méthode de couplage sur le passé. Considérons la marche aléatoire sur les sommets du triangle de l'exercice IV.7.1.3. On identifiera les trois sommets aux nombres 0, 1 et 2.

1. On décide de paramétrer la chaîne par une addition modulo 3

$$X_{n+1} = X_n + U_n \pmod{3}, \quad P(U_n = -1) = P(U_n = 1) = \frac{1}{2}.$$

Montrer que la convergence de $\varphi_n(x, \omega)$ vers une limite indépendante de x est impossible.

2. On propose une paramétrisation différente avec les transitions suivantes selon la valeur de U

$$U = -1 : \begin{array}{l} 0 \rightarrow 1 \\ 1 \rightarrow 0 \\ 2 \rightarrow 0 \end{array} \qquad U = 1 : \begin{array}{l} 0 \rightarrow 2 \\ 1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 1 \end{array}$$

Vérifier que la loi de la chaîne est la même. Observer l'effet de deux valeurs différentes de U successives sur la chaîne et en déduire que $\varphi_n(x, \omega)$ converge avec probabilité 1.

VII

OPTIMISATION PAR MONTE-CARLO

On discutera dans ce chapitre de deux méthodes : l'approximation stochastique et le recuit simulé. L'approximation stochastique étudie la résolution d'un problème d'optimisation sur des données bruitées. En revanche, dans le recuit simulé le problème est déterministe et bien posé, *minimiser une fonction V sur un ensemble E* , mais l'algorithme de recherche est randomisé afin de bien parcourir l'ensemble E .

Les deux méthodes sont donc fondamentalement différentes : dans un cas l'aléatoire vient des données tandis que dans l'autre il est introduit dans l'algorithme. Mentionnons dès maintenant la référence [3] qui traite de ces méthodes.

VII.1 Approximation stochastique

L'approximation stochastique est un domaine difficile où les résultats généraux nécessitent des jeux d'hypothèses compliqués et où les preuves sont généralement assez ardues ; voir cependant [19] pour une situation raisonnablement générale traitée complètement. Nous renvoyons pour les études théoriques aux traités généraux [4, 33, 12], et à [4, 40] pour ce qui est des applications. Nous ne nous livrons ici qu'à une discussion assez informelle.

VII.1.1 Deux exemples simples

Gradient bruité. La méthode de gradient pour minimiser une fonction $V(\theta)$ consiste à réaliser l'algorithme suivant

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \gamma \nabla V(\theta_{n-1})$$

qui pour γ assez petit converge assez vite vers un minimum de V (sous certaines hypothèses...).

Supposons maintenant que l'on ne puisse mesurer le gradient qu'avec un certain bruit. C'est-à-dire que l'on peut faire des mesures où l'on observe $\nabla V(\theta) + \xi$ où θ est au choix mais ξ est une v.a de moyenne nulle. Ceci arrive si par exemple le calcul de V passe par des espérances que l'on estime par simulation.

L'algorithme stochastique consiste à s'inspirer de la méthode du gradient de la façon suivante :

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \gamma_n (\nabla V(\theta_{n-1}) + \xi_n).$$

La n -ième expérience a donc été faite avec le paramètre θ_{n-1} , et l'on a mesuré $Y_n = \nabla V(\theta_{n-1}) + \xi_n$. Des calculs théoriques conduisent à deux observations importantes : La première est que le bon choix de γ_n est

de prendre ce gain d'ordre $1/n$ (p.ex. $\gamma_n = \frac{a}{n+b}$). La seconde est que l'idée d'essayer de faire des expériences successives avec le même θ pour estimer $\nabla V(\theta)$ en moyennant, et ensuite utiliser l'algorithme déterministe est mauvaise, c'est-à-dire conduira à une variance d'estimation supérieure pour un nombre fixé d'expériences.

Un algorithme stochastique peut donc être vu comme un algorithme déterministe où l'on a oublié le signe d'espérance et modifié le gain en conséquence.

Moyenne empirique. Un cas particulier de gradient stochastique est $V(\theta) = E[(Y - \theta)^2]/2$, où Y est une v.a. dont on peut observer des réalisations; ici V atteint son minimum en $\theta^* = E[Y]$. On ne peut pas observer $\nabla V(\theta) = \theta - E[Y]$ mais des réalisations de Y , et donc de $\theta - Y$ dont l'espérance est bien $\nabla V(\theta)$; d'où l'algorithme

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \gamma_n(\theta_{n-1} - Y_n).$$

On observe facilement que si $\gamma_n = 1/n$, et $\theta_0 = 0$ alors $\theta_n = (Y_1 + \dots + Y_n)/n$.

Dosage : un algorithme de Robbins-Monro. Soit un paramètre réel θ représentant un dosage entre différents produits. Pour chaque θ , on peut faire une expérience dont le résultat est un nombre réel Y (quantité de chaleur produite,...); autrement dit, θ paramétrise la loi de Y . On cherche à résoudre l'équation

$$E_\theta[Y] = \alpha. \tag{VII.1}$$

Là encore on observe Y alors qu'il faudrait $E_\theta[Y]$. On suppose que $E_\theta[Y]$ est une fonction continue strictement croissante de θ . L'algorithme de Robbins-Monro consiste à faire une série d'expériences avec un choix de paramètre dépendant à chaque fois des résultats précédents :

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma_n(\alpha - Y_n).$$

Ici Y_n est le résultat de l'expérience faite avec θ_{n-1} . L'algorithme augmente donc θ si Y est trop faible et le fait diminuer sinon.

On montre alors, sous des hypothèses raisonnables, la convergence de θ_n vers la solution θ^* de (VII.1). Cet algorithme est le pendant stochastique de l'algorithme déterministe

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma E_{\theta_{n-1}}[\alpha - Y_n].$$

Dans ce dernier algorithme on sait qu'on a intérêt à prendre γ constant. Pour une démonstration, on pourra consulter [19] pp. 240-244.

Apprentissage, deep learning, et réseaux de neurones. Il s'agit de prédire au mieux une variable $y \in \{0, 1\}$ à partir d'un vecteur de variables explicatives. On dispose d'un ensemble d'apprentissage formé de paires d'exemples (x_i, y_i) , et l'on propose une forme de fonction de prédiction (réseau de neurones) $\hat{y}_i = f(\theta, x_i)$, où θ est un paramètre à estimer. Il n'est pas rare que θ compte des dizaines de milliers de composantes voire des millions, et que le nombre d'exemples se compte en millions lorsque l'on travaille en traitement d'images¹. On se donne également une fonction de coût $l(y_i, \hat{y}_i)$ pour les erreurs de prédiction, par exemple² $l(a, b) = \max(1 - ab, 0)$. Dans ce cas l'optimisation directe (minimisation de $\sum l(y_i, \hat{y}_i)$) est trop difficile et la pratique a conduit à utiliser

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \gamma_n \nabla_\theta l(y_n, f(\theta, x_n))$$

Le gain γ_n est choisi typiquement de la forme $\gamma_n = a/(b+n)$, et les paramètres a et b sont en pratique appris lors d'essais préliminaires.

1. A. KRIZHEVSKY, I. SUTSKEVER, G.E. HINTON, "ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks", in *NIPS*, 2012, pp. 1-9.

Q.V. LE, J. NGIAM, A. COATES, A. LAHIRI, B. PROCHNOW, "On optimization methods for deep learning", *ICML* 2011.

2. L. BOTTOU, O. BOUSQUET, "The tradeoffs of large scale learning", *NIPS*, 2008

VII.1.2 Forme générale et accélération

Dans toute la suite, le signe ∇ désignera le gradient par rapport à la variable θ . Le problème général est le suivant :

- ▶ Cas stationnaire : On cherche à résoudre en θ l'équation $E[H(Y, \theta)] = 0$ où Y est une v.a. et $H(y, \theta)$ une certaine fonction. À chaque instant n , on dispose d'une réalisation de $H(Y_n, \theta)$ en un point θ de son choix.
- ▶ Cas Robbins-Monro : Ici la loi de Y peut dépendre de θ , l'équation est $E_\theta[H(Y, \theta)] = 0$ et Y_n est tiré selon P_θ .

L'algorithme stochastique associé est :

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma_n H(Y_n, \theta_{n-1}).$$

Une situation typique est le cas du **gradient stochastique** : On cherche à minimiser en θ un coût moyen $V(\theta) = E[Q(Y_n, \theta)]$, et dans ce cas $H(Y_n, \theta) = -\nabla Q(Y_n, \theta)$. Ici les Y_n sont typiquement i.i.d.

On montre que pour $\gamma_n = c/n^\alpha$, $1/2 < \alpha \leq 1$, et c pas trop grand si $\alpha = 1$, θ_n convergera vers la solution θ^* du problème, et il y a normalité asymptotique de $(\theta_n - \theta^*)/\sqrt{\gamma_n}$. Le dernier point pousse à prendre $\alpha = 1$, mais le choix de c devient critique : quand $\alpha = 1$, si c est trop grand la variance asymptotique de $\sqrt{n}(\theta_n - \theta^*)$ se met à augmenter et si c est inférieur à un certain seuil $\sqrt{n}(\theta_n - \theta^*)$ devient d'ordre $n^{-\alpha}$ avec $\alpha < 1/2$.

Gain optimal. Accélération. Posons $h(\theta) = E_\theta[H(\theta, Y)]$. Dans le cas stationnaire un meilleur choix (en terme de variance d'estimation) est de prendre un gain matriciel

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \Gamma_n^{-1} H(Y_n, \theta_{n-1}) \tag{VII.2}$$

$$\Gamma_n = - \sum_{k=1}^n \nabla H(Y_k, \theta_{k-1}). \tag{VII.3}$$

ou mieux $\Gamma_n = -n \nabla h(\theta_{n-1})$, si cette quantité est connue ; ce dernier choix convient également pour le cas Robbins-Monro. On peut en effet montrer que *si l'algorithme ci-dessus est stable*, il conduit très généralement à la meilleure variance asymptotique possible (borne de Cramér-Rao pour la variance de $\sqrt{n}(\theta_n - \theta^*)$) qui est, pour des Y_i indépendants, la variance de $\nabla h(\theta^*)^{-1} H(Y_n, \theta^*)$. Noter qu'on retrouve dans le cas du gradient stochastique un algorithme du type Newton. Si cette méthode ne peut être employée (comme dans le cas du dosage), on peut avoir intérêt à utiliser l'algorithme avec moyennisation, dit « de Ruppert-Polyak »³ :

$$\begin{aligned} \theta_n &= \theta_{n-1} + \gamma_n H(Y_n, \theta_{n-1}) \\ \bar{\theta}_n &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \theta_k \end{aligned}$$

où un bon choix de γ_n est d'ordre $n^{-2/3}$; $\sqrt{n}(\bar{\theta}_n - \theta^*)$ converge en loi vers une gaussienne de variance optimale. En pratique, on laissera un temps d'échauffement avant de commencer la moyennisation (deuxième équation) car les premiers θ_n sont souvent assez mauvais.

Convergence et trajectoire moyenne. De manière générale, la convergence n'a lieu que si les trajectoires de

$$\frac{d\bar{\theta}(t)}{dt} = h(\bar{\theta}(t)), \quad h(\theta) = E[H(Y, \theta)], \tag{VII.4}$$

convergent pour tout $\bar{\theta}(0)$. La convergence de ces trajectoires ne pose généralement pas trop de problème dans le cas d'un algorithme de gradient ($h(\theta) = -\nabla V(\theta)$), cf exercice VII.3.1. Le champ h est appelé « champ

3. B.T. Polyak, "New stochastic Approximation Type Procedures", *Autom. & Remote Contr.*, 51(7).

moyen» et ses trajectoires sont appelées «trajectoires moyennes» car elles représentent le comportement moyen de la suite θ_n , sous des hypothèses adéquates ; on a l'approximation par des morceaux de trajectoire moyenne :

$$\theta_{n+p} \simeq \bar{\theta}(\gamma_n + \dots \gamma_{n+p}), \quad \bar{\theta}(0) = \theta_n, \quad p = 1, 2, \dots$$

l'approximation étant d'autant meilleure que l'instant de départ n est grand.

Sans entrer dans les détails, disons que cette approximation est surtout valide pour n grand. L'heuristique cachée derrière cette idée est :

$$\theta_{n+p} = \theta_n + \sum_{k=1}^p \gamma_{n+k} H(Y_{n+k}, \theta_{n+k-1}) \simeq \theta_n + \sum_{k=1}^p \gamma_{n+k} h(\theta_{n+k-1})$$

à un terme de moyenne nulle près, petit si n est assez grand (sa variance est d'ordre $\sum_{i=n}^{n+p} \gamma_i^2$). L'étude rigoureuse est bien entendu difficile ; les conditions sur γ_n sont $\sum \gamma_n = +\infty$ et $\sum \gamma_i^2 < \infty$.

Aspects pratiques. Gain constant. Le réglage du gain est souvent difficile. Il est fréquemment plus simple de commencer par faire tourner l'algorithme avec un gain constant γ pour avoir une idée de l'endroit où se trouve θ_* avec une précision d'ordre $\sqrt{\gamma}$. L'estimée obtenue peut alors servir de point de départ pour un algorithme à pas décroissant.

VII.1.3 La régression linéaire

On observe des paires $(y_n, x_n) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ et l'on cherche le vecteur θ^* minimisant l'erreur de prédiction linéaire de y_n avec x_n :

$$\theta^* = \arg \min E[(y_n - x_n \theta^*)^2].$$

On supposera que la suite (y_n, x_n) est i.i.d. Un premier algorithme est l'algorithme de gradient :

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma_n x_n^T (y_n - x_n \theta_{n-1}) \tag{VII.5}$$

qui minimise $E[(y_n - x_n^T \theta)^2]$, cf l'exercice VII.3.3. Si l'on essaye de l'améliorer selon l'équation (VII.2), on obtient l'algorithme RLS (Recursive Least Squares) :

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \frac{1}{n} R_n^{-1} x_n^T (y_n - x_n \theta_{n-1}), \quad R_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^T x_i, \tag{VII.6}$$

qui doit être modifié pour les n petits, en raison de la non-inversibilité de R_n ; noter que, si l'on fait abstraction de cette modification, et si $\theta_0 = 0$, θ_n coïncide avec

$$\theta_n = (nR_n)^{-1} \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

(multiplier (VII.6) par nR_n) qui est exactement l'estimée aux moindres carrés (le θ qui minimise $\sum_i (y_i - x_i \theta)^2$). On préfère souvent exprimer le calcul de R_n de façon récursive avec un calcul direct de $\Gamma_n = (\sum_{i=1}^n x_i^T x_i)^{-1}$

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \Gamma_n x_n^T (y_n - x_n \theta_{n-1}), \quad \Gamma_n = \Gamma_{n-1} - \frac{\Gamma_{n-1} x_n^T x_n \Gamma_{n-1}}{1 + x_n \Gamma_{n-1} x_n^T}.$$

Exemple : Annulation de bruit. Afin de permettre aux conducteurs de téléphoner au volant de leur voiture on se propose de fixer un micro au volant. Ce micro enregistre la somme du signal de parole et du bruit ambiant

$$y_n = p_n + b_n.$$

Un second micro placé au plafond, derrière le conducteur, enregistre le bruit seul. Il reçoit un signal r_n qu'on espère proche de b_n . Le signal transmis au correspondant sera de la forme

$$t_n = y_n - \theta r_n.$$

Le meilleur θ est celui qui rendra t_n aussi proche que possible de p_n et donc qui minimisera $E[(t_n - p_n)^2]$. Comme p_n est indépendant de b_n et r_n , on a en vertu du théorème de Pythagore

$$E[t_n^2] = E[(t_n - p_n + p_n)^2] = E[(t_n - p_n)^2] + E[p_n^2].$$

Le meilleur θ minimise donc l'énergie de t_n , c'est la corrélation entre r et y .

De manière plus générale on pose $x_n = (r_n, \dots, r_{n-d+1})$, $\theta \in \mathbb{R}^d$ et l'on minimise $E[(y_n - x_n \theta)^2]$. C'est un problème de régression linéaire pour lequel on peut utiliser le RLS.

VII.1.4 Exemple : Données manquantes

Reprenons la situation du § IV.4.4. On dispose d'une famille paramétrique de lois candidates p_θ pour un ensemble de données X partiellement observées. On note $X = (Y, Z)$, où Y est la partie observée et Z la partie manquante. L'algorithme de maximum de vraisemblance consiste à maximiser la probabilité des données observées :

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} p_\theta(Y), \quad p_\theta(Y) = \int p_\theta(Y, z) dz. \quad (\text{VII.7})$$

L'intégrale est trop compliquée à calculer, mais on sait tirer des échantillons selon $p_\theta(z|Y)$, cf l'exemple du § IV.4.4. L'algorithme SAEM (stochastic approximation EM) consiste à faire :

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \gamma_{n+1} \nabla \log p_{\theta_n}(Y, Z_n) \quad (\text{VII.8})$$

où la variable Z_n est simulée à chaque étape selon la loi $p_{\theta_n}(z|Y)$, et γ_n est le gain. Le champ moyen de l'algorithme est

$$h(\theta) = \int \nabla \log p_\theta(Y, z) p_\theta(z|Y) dz = \int \frac{\nabla p_\theta(Y, z)}{p_\theta(Y, z)} \frac{p_\theta(Y, z)}{p_\theta(Y)} dz = \nabla \log(p_\theta(Y)).$$

On a donc un algorithme de gradient dont la limite sera un maximum de $p_\theta(Y)$, si toutes les hypothèses techniques non mentionnées ici sont vérifiées.

Gain matriciel. Il est bien connu et simple à démontrer que l'on a

$$\nabla h(\theta) = \nabla E_\theta[\nabla \log p_\theta(Y, z)|Y] = E_\theta[\nabla^2 \log p_\theta(Y, z)|Y] + \text{Cov}_\theta(\nabla \log p_\theta(Y, z)|Y).$$

Le membre de droite donnant le gain optimal cf (VII.1.2), on est conduit à

$$\begin{aligned} \theta_n &= \theta_{n-1} - \Gamma_n^{-1} h_n, & h_n &= \nabla \log p_\theta(Y, Z_n) \\ M_n &= M_{n-1} + h_n \\ S_n &= S_{n-1} + \nabla^2 \log p_\theta(Y, Z_n) + h_n h_n^T \\ \Gamma_n &= S_n - M_n M_n^T / n. \end{aligned}$$

Comme $\hat{\theta}$ maximise $\log p_\theta(Y)$, $\nabla h(\hat{\theta})$ devrait être une matrice définie négative. Ceci n'implique cependant pas que Γ_n le soit ce qui fait que l'algorithme doit être mis en œuvre avec précautions. Noter la parenté de cet algorithme avec celui de l'exercice IV.7.3.18.

VII.1.5 Exemple : Algorithme de Kiefer-Wolfowitz

Supposons que l'on cherche à régler un paramètre θ d'un robot (ou une commande) de sorte à ce qu'il atteigne au mieux sa cible dans des configurations différentes (de bruit, ou de positionnement de la cible...). On est alors (en général) dans la situation du § VII.1.2 sauf que l'on ne sait pas calculer le gradient de la fonction que l'on veut optimiser⁴. En particulier, contrairement à la situation Robbins-Monro, on ne sait pas du tout dans quelle direction modifier le paramètre.

Une expérience avec un certain θ et certaines conditions permettra d'évaluer une performance (distance à la cible...) $Q(Y, \theta)$ où la v.a. Y , a priori non observée, représente ici l'aléa (la position de la cible, les bruits,...). On cherche à minimiser $E[Q(Y, \theta)]$. Une solution est de faire les expériences par paire de sorte à estimer le gradient ; l'algorithme devient si θ est scalaire

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma_n \frac{Q(Y_n, \theta_{n-1} + c_n) - Q(Y'_n, \theta_{n-1} - c_n)}{2c_n}$$

où l'on a en plus les conditions $\sum (\gamma_n/c_n)^2 < \infty$ et $c_n \rightarrow 0$ qui vont garantir la convergence [40] ; un bon choix est $\gamma_n = \gamma_1/n$, $c_n \sim 1/\log(n)$, qui conduit à la avec normalité asymptotique de $c_n\sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta^*)$ si γ_1 est assez grand [19]⁵.

Si θ est vectoriel on tire à chaque fois un vecteur aléatoire Δ_n de ± 1 , et le quotient ci-dessus est remplacé par $(2c_n)^{-1}\Delta_n(Q(Y_n, \theta_{n-1} + c_n\Delta_n) - Q(Y'_n, \theta_{n-1} - c_n\Delta_n))$.

VII.1.6 Exemple : Optimisation d'une chaîne de Markov contrôlée

On se donne une chaîne de Markov X_n dont la dynamique s'écrit

$$X_n = f(X_{n-1}, \theta, \xi_n) \tag{VII.9}$$

où θ est un paramètre et ξ_n une suite i.i.d de distribution connue. On cherche la valeur de θ qui minimise un coût moyen $E[Q(X_n)]$.

Si l'on considère X_n comme une fonction de θ , X_0 et des ξ_n , on peut dire que l'on cherche à minimiser $E[Q(X_n(\theta), \theta)]$. Pour construire l'algorithme stochastique correspondant, il va falloir dériver X_n par rapport à θ . Si l'on note X'_n cette dérivée, on a

$$X'_n = f_\theta(X_{n-1}, \theta, \xi_n) + f_X(X_{n-1}, \theta, \xi_n)X'_{n-1} \tag{VII.10}$$

d'où l'algorithme complet

$$\begin{aligned} \theta_n &= \theta_{n-1} - \gamma_n (\nabla_x Q(X_{n-1}, \theta_{n-1})X'_{n-1} + \nabla_\theta Q(X_{n-1}, \theta_{n-1})) \\ X_n &= f(X_{n-1}, \theta_{n-1}, \xi_n) \\ X'_n &= f_\theta(X_{n-1}, \theta_{n-1}, \xi_n) + f_X(X_{n-1}, \theta_{n-1}, \xi_n)X'_{n-1} \end{aligned}$$

où l'indice indique la variable par rapport à laquelle on dérive. Noter que dans la dernière équation X'_n n'est qu'une approximation de la dérivée, puisque θ évolue ; cette approximation est rendue valide par le fait que θ change de plus en plus lentement : l'étude du champ moyen sort du cadre établi jusqu'à présent et relève du § VII.1.7.

Tout ceci n'est bien entendu valable que si l'équation (VII.10) donne un système stable, c'est-à-dire que X_n est effectivement une fonction régulière de θ . C'est par exemple le cas si $f(X, \theta, \xi) = X\theta + \xi$, pour $|\theta| < 1$ car alors $X_n = \xi_n + \theta\xi_{n-1} + \theta^2\xi_{n-2} + \dots$

4. Voir par exemple l'article : H.F. Chen, H-T. Fang, "Output Tracking for Nonlinear Stochastic Systems by Iterative Learning Control", *IEEE Trans. Automatic Control*, Vol.49, No.4, 583-588, 2004.

5. Voir aussi V. Koval, R. Schwabe, "A law of the iterated logarithm for stochastic approximation procedures in d-dimensional Euclidean space", *Stochastic Processes and their Applications*, Vol.105, 2, Pages 299-313, 2003

Marbach et Tsitsiklis⁶ traitent un exemple où l'espace d'états est fini et donc la dérivation de X_n est impossible.

VII.1.7 Cadre général à dynamique markovienne

Le cadre du § VII.1.2 est trop restrictif car il ne contient pas en particulier l'exemple du paragraphe précédent car $Y_n = (X_n, X'_n)$ a une dynamique markovienne. On considère donc plus généralement des algorithmes de la forme :

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma_n H(Y_n, \theta_{n-1}).$$

où la loi de Y_n sachant le passé est donnée par la probabilité de transition $P_{\theta_{n-1}}(Y_n, dy)$ (une famille de probabilités de transition $P_\theta(x, dy)$ est donc donnée à l'avance).

On peut montrer que sous certaines hypothèses (en particulier la stabilité de la chaîne (θ_n, Y_n)) cet algorithme convergera vers une solution de $E_\theta[H(Y, \theta)] = 0$ où l'espérance est prise sous la mesure invariante de P_θ . L'hypothèse essentielle est toujours la convergence de la trajectoire moyenne

$$\frac{d\theta_t}{dt} = h(\theta_t), \quad h(\theta) = E_\theta[H(Y, \theta)].$$

S'il y a forte dépendance de la loi de la chaîne par rapport à θ , l'algorithme (VII.2) perd de son sens et il est difficile de trouver une matrice de gain adéquate. Toutefois la méthode de Ruppert-Polyak s'applique toujours.

VII.1.8 Algorithmes de poursuite

Reprenons l'exemple de la régression, mais on va supposer maintenant que θ^* varie lentement au cours du temps car les processus ne sont pas stationnaires. Supposons que l'on ait l'équation

$$y_n = x_n \theta_n^* + u_n$$

avec (x_n, u_n) i.i.d. Les changements de θ^* font que (y_n, x_n) n'est plus stationnaire. L'idée des algorithmes adaptatifs est de ne plus prendre γ_n tendant vers 0, car on ne cherche plus à avoir convergence vers une valeur fixe, mais de prendre γ constant :

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma x_n^T (y_n - x_n \theta_{n-1})$$

ou encore en RLS :

$$\begin{aligned} \theta_n &= \theta_{n-1} + \gamma R_n^{-1} x_n^T (y_n - x_n \theta_{n-1}) \\ R_n &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^T x_i. \end{aligned}$$

Dans cette dernière équation, si x_n a une dynamique lentement variable, il vaut mieux prendre⁷

$$R_n = R_{n-1} - \gamma (R_{n-1} - x_n^T x_n).$$

Le choix de la meilleure valeur de γ est difficile; le mieux est de la déterminer par simulation.

L'algorithme BMP⁸. Soit un algorithme

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \gamma H(\theta_{n-1}, X_n)$$

6. P. Marbach, J.N Tsitsiklis, "Simulation-based optimization of Markov reward processes", *IEEE Trans. Automat. Control*, 46, no. 2, 191-209, 2001.

7. L. Ljung, S. Gunnarson, "Adaptation and tracking in system identification—a survey", *Automatica-J IFAC*, 26 (1990), 7-21.

8. [4] p.160

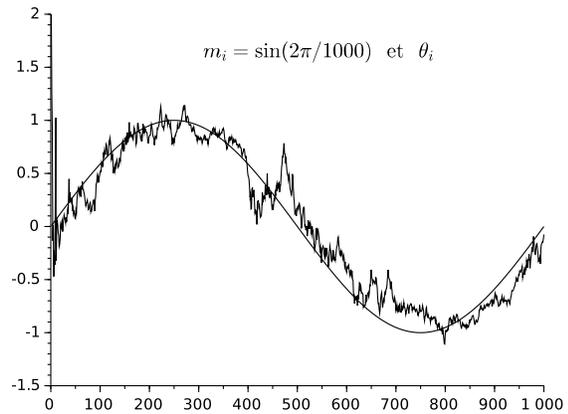
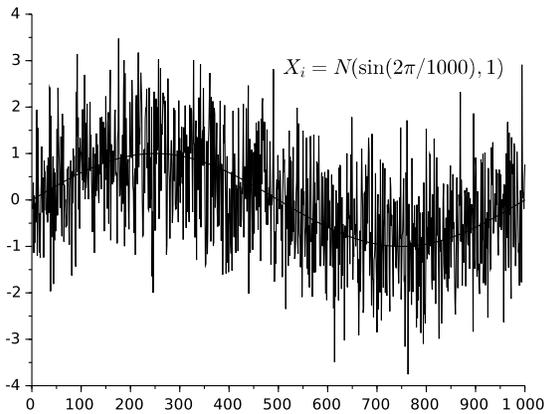
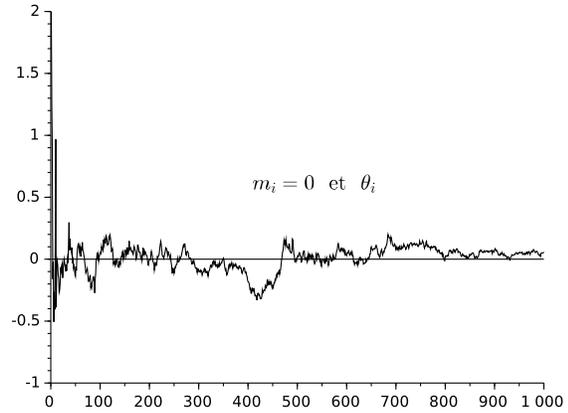
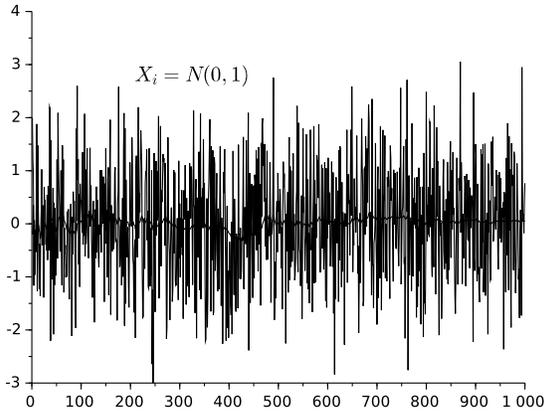
dont l'objectif est de minimiser $E[V(\theta, X_n)]$, par exemple $H = -\nabla V$. Si l'on considère la fonction de coût $E[V(\theta_{n-1}^\gamma, X_n)]$, où l'espérance prend en compte le caractère aléatoire de θ issu de l'équation ci-dessus, et où le paramètre est désormais γ , on peut fabriquer un algorithme de gradient sur γ afin de minimiser ce coût. On est donc dans le cadre d'une dynamique markovienne où l'état X est désormais (θ, X) et θ est maintenant γ . Pour obtenir un algorithme plus stable, on va raisonner sur $\lambda = -\ln(\gamma)$. En remarquant que $\partial_\lambda V(\theta_{n-1}^\lambda, X_n) = \nabla V(\theta_{n-1}^\lambda, X_n) \partial_\lambda \theta_n$ et en notant $\theta'_n = \partial_\lambda \theta_n$, il vient donc

$$\begin{aligned}\theta_n &= \theta_{n-1} + e^{-\lambda_{n-1}} H(\theta_{n-1}, X_n) \\ \theta'_n &= \theta'_{n-1} - e^{-\lambda_{n-1}} H(\theta_{n-1}, X_n) + e^{-\lambda_{n-1}} \nabla H(\theta_{n-1}, X_n) \theta'_{n-1} \\ \lambda_n &= \lambda_{n-1} - \mu \nabla V(\theta_{n-1}, X_n) \theta'_{n-1}\end{aligned}$$

où μ est le gain de l'algorithme global. Si l'on applique cet algorithme à l'estimation de la moyenne, $V(\theta, x) = \frac{1}{2}(\theta - x)^2$, $H = -\nabla V$, il vient

$$\begin{aligned}\theta_n &= \theta_{n-1} - e^{-\lambda_{n-1}} (\theta_{n-1} - X_n) \\ \theta'_n &= \theta'_{n-1} + e^{-\lambda_{n-1}} (\theta_{n-1} - X_n) - e^{-\lambda_{n-1}} \theta'_{n-1} \\ \lambda_n &= \lambda_{n-1} - \mu (\theta_{n-1} - X_n) \theta'_{n-1}.\end{aligned}$$

Noter que θ_n est une moyenne des X_i passés, et θ'_n une moyenne des $\theta_{i-1} - X_i$. Voici deux simulations correspondant à $X_i \sim \mathcal{N}(0, m_i)$, pour $m_i = 0$ et $m_i = \sin(2i\pi/1000)$. On a choisi $\theta_1 = 2, \mu = 0.5$:



L'algorithme souffre toutefois d'instabilité et sa mise en place doit être prudente, par exemple en divisant $\nabla V(\theta_{n-1}, X_n) \theta'_{n-1}$ par $1 + |\nabla V(\theta_{n-1}, X_n) \theta'_{n-1}|$ dans l'équation d'évolution de λ .

VII.2 Recuit simulé

Soit E un ensemble grand mais fini et V une fonction réelle définie sur E . On cherche le minimum de V . L'exemple typique d'application du recuit simulé est le problème du voyageur de commerce : trouver un chemin fermé le plus court possible qui passe par un ensemble de villes données ; E est donc l'ensemble des tels chemins. L'idée est de simuler les distributions de probabilité suivante sur E

$$\pi_\beta(i) = Z_\beta^{-1} e^{-\beta V(i)}$$

où β est un paramètre et Z_β est la constante de normalisation. On voit en effet facilement que lorsque β tend vers $+\infty$, π_β tend vers la mesure uniforme sur les minima globaux de V .

Si β est fixe, on est dans la situation d'utilisation de l'algorithme de Metropolis avec $f_i = e^{-\beta V(i)}$. Il suffit de se donner une matrice de transition P sur E ; dans le cas du voyageur de commerce, on choisit typiquement pour p_{ij} la mesure uniforme sur tous les chemins j qui se déduisent de i par l'interversion de deux villes (bien d'autres possibilités existent...). En simulant cette loi avec β grand, on visitera sans doute assez souvent de bonnes solutions ; malheureusement, plus β est grand, plus les transitoires sont longs (la chaîne de Markov a une dynamique très faible car les changements qui augmentent V seront massivement refusés).

L'idée du recuit simulé est de faire augmenter β au cours de l'algorithme de Metropolis ; il faut donc donner une suite croissante β_n , avec l'idée que la loi de la variable simulée X_n sera toujours approximativement π_{β_n} . D'où l'algorithme, où X^* désigne la meilleure solution trouvée jusqu'au temps n :

44 - ALGORITHME Tirage de X_n

1. Tirer Y_n parmi les voisins de X_{n-1} selon une loi prédéterminée (généralement uniforme)
2. Faire aléatoirement $X_n = Y_n$ ou $X_n = X_{n-1}$ avec probabilité q et $1 - q$:

$$q = e^{-\beta_n(V(Y_n) - V(X_{n-1}))_+}$$

3. Enregistrement du meilleur : si $V(X_n) < V(X_{n-1}^*)$ faire $X_n^* = X_n$.

On voit donc que la transition est acceptée sûrement si $V(Y_n) \leq V(X_{n-1})$, et éventuellement sinon. On accepte donc parfois des transitions qui font augmenter V , ce qui permet d'éviter les minima locaux.

La difficulté est que si β augmente trop vite, on « gèle » l'algorithme et l'on ne poursuit plus π_β : l'algorithme se calera dans une région où V fait une cuvette. La règle théorique est de prendre à chaque instant $\beta_n = C / \log(n)$, pour un C assez grand⁹ ; cependant l'application brute de cette formule, avec le C recommandé, donne en général des algorithmes extrêmement longs. Cela vient en partie du fait que les études de convergence du recuit simulé se soucient de la convergence en loi de X_n et non pas de celle de X_n^* . La convergence de ce dernier ne requiert pas que β tende vers 0.

La convergence est donc a priori très lente et l'efficacité observée de la méthode dans des situations concrètes est une affaire de praticien.

Il est souvent assez difficile de trouver une vitesse de croissance de β adéquate. Il faut remarquer qu'un β un peu trop grand aura pour effet de transformer l'algorithme en algorithme de descente pure et un β trop petit fera accepter quasiment toutes les transitions. Il y a donc un juste milieu à adopter, qui laisse en réalité

9. Pour tout x , on définit le coût d'un chemin partant de x et menant au minimum de V comme le maximum de $(V(y) - V(x))_+$ sur tous les points y de ce chemin ; ce coût est nul si le chemin descend. On définit ensuite $c(x)$ comme le coût minimum de tout les chemins menant au minimum de V . $c(x)$ est nul si l'on peut aller de x au minimum en descendant. C est alors le maximum de $c(x)$ pour tous les x .

Voir : B. Hajek, "Cooling schedules for optimal annealing", *Math. Oper. Res.*, 13 (1988), no. 2, 311-329.

une marge assez faible; on trouve en effet par calcul, que si les $V(j) - V(i)$ sont du même ordre, disons δ , pour j voisin de i , et si q est le nombre de voisins de chaque point, alors :

$$\beta_{min} \simeq \delta^{-1}, \quad \beta_{max} \simeq \delta^{-1} \log(q)$$

au sens où si $\beta < \beta_{min}$, on accepte en gros toute transition une fois sur deux, et si $\beta > \beta_{max}$ on attend d'avoir visité tous les voisins avant d'accepter une transition montante.

On peut par exemple estimer un β_n raisonnable de manière adaptative par :

$$\delta_n = \delta_{n-1} + \frac{1}{n} |V(Y_n) - V(X_{n-1})| \quad \text{ou bien} \quad \delta_{n-1} + \frac{1}{n} (V(Y_n) - V(X_{n-1}))_+$$

$$\beta_n = c \delta_n^{-1} \log(q)$$

où q est le nombre de voisins d'un point et c une constante inférieure à 1 à calibrer.

Une solution alors efficace est d'utiliser une règle du type de la précédente et de faire varier la taille des voisinages : au début on prend des voisinages de grande taille pour bien visiter l'espace et l'on réduit peu à peu; dans le cas du voyageur de commerce, on pourra ainsi se restreindre à des interversions de villes de plus en plus proches au fur et à mesure de l'avancée de l'algorithme.

Le recuit simulé a été utilisé pour des problèmes très différents pour lesquels les minimums locaux sont nombreux. Citons le problème de la prédiction de la structure des protéines : il s'agit de minimiser une fonction $V(x_1, \dots, x_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^3$ est la position du i -ième atome de la protéine; cette fonction fait intervenir les angles et les distances entre atomes successifs¹⁰. Mentionnons également l'application à la restauration d'images traitée dans l'article des Geman cité en note page 52.

VII.3 Exercices

Exercice VII.3.1 On suit les notations du § VII.1.2. Montrer que si $V(\theta)$ est strictement convexe et tend vers l'infini, alors l'équation différentielle $\dot{\theta} = -\nabla V(\theta)$ converge vers le minimum de V (on montrera que $V(\theta_t)$ tend vers une limite, et que $\int |\nabla V(\theta_t)|^2 dt < \infty$; on conclura par l'absurde).

Exercice VII.3.2 Soit X_n une suite de v.a.i.i.d. et $0 < \alpha < 1$. Quel est le champ moyen de l'algorithme

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \gamma_n (1_{X_n < \theta_{n-1}} - \alpha).$$

Vérifier que l'algorithme est un algorithme de gradient. Vers quelle valeur devrait converger l'algorithme?

Exercice VII.3.3 Vérifier que (VII.5) est l'algorithme de gradient pour minimiser $E[(y_n - x^T \theta)^2]$ et construire l'algorithme correspondant à la minimisation de $E[|y_n - x_n^T \theta|]$.

Exercice VII.3.4 Une machine à sous a deux bras. La probabilité de gain avec le bras A (resp. B) est inconnue et vaut p_A (resp. p_B). Un joueur veut estimer quel bras a la plus grande probabilité de gain sans perdre trop d'argent. Sa stratégie est la suivante : au temps n , il choisit la machine A (resp. B) avec probabilité θ_{n-1} (resp. $1 - \theta_{n-1}$) et

$$\theta_n = \begin{cases} \theta_{n-1} & \text{s'il a perdu} \\ \theta_{n-1} + \gamma_n (1 - \theta_{n-1}) & \text{s'il a gagné sur } A \\ \theta_{n-1} - \gamma_n \theta_{n-1} & \text{s'il a gagné sur } B \end{cases}$$

¹⁰. Voir le § 8 de : A. Neumaier, *Molecular modeling of proteins and mathematical prediction of protein structure*, *Siam Rev.*, 39 (1997), 407-460.

Il espère que θ_n convergera vers 1 (resp. 0) si A (resp. B) est la meilleure machine¹¹. Calculer le champ moyen. Vérifier que si $\theta^* = 0$ (resp. 1) alors $E[\theta_n]$ est décroissant (croissant).

Exercice VII.3.5 (Pseudo-vraisemblances et données manquantes) On reprend l'exemple du §VII.1.4 mais on suppose que $p_\theta(Y, z)$ est trop difficile à calculer (ce qui arrive typiquement si $p_\theta(Y, z) = f_\theta(Y, z)/Z(\theta)$ où $Z(\theta)$ ne possède pas d'expression explicite, comme dans le cas des champs de Gibbs), si bien que l'on utilise une pseudo-vraisemblance $q_\theta(Y, z)$ dans la formule (VII.7). Vérifier que

$$\nabla E_\theta[\nabla \log q_\theta(Y, z)|Y] = E_\theta[\nabla^2 \log q_\theta(Y, z)|Y] + Cov_\theta(\nabla \log p_\theta(Y, z), \nabla \log q_\theta(Y, z)|Y)$$

et que l'algorithme accéléré est donc

$$\begin{aligned}\theta_n &= \theta_{n-1} - \Gamma_n^{-1} h_n, & h_n &= \nabla \log q_\theta(Y, Z_n) \\ M_n &= M_{n-1} + h_n \\ N_n &= N_{n-1} + k_n, & k_n &= \nabla \log f_\theta(Y, Z_n) \\ S_n &= S_{n-1} + \nabla^2 \log q_\theta(Y, Z_n) + h_n k_n^T \\ \Gamma_n &= S_n - M_n N_n^T / n.\end{aligned}$$

11. Cette convergence a été prouvée par G. Pagès, D. Lambertson et P. Tarrès : "When can the two-armed bandit algorithm be trusted?", *The Annals of Applied Probability*, 14(3), 1424-1454, 2004

VIII

SIMULATION D'ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES STOCHASTIQUES

VIII.1 Introduction

Il s'agit d'approcher numériquement la solution de l'équation différentielle stochastique

$$dx_t = b(x_t)dt + \sigma(x_t)dw_t \tag{VIII.1}$$

partant d'un point donné (pour un exposé introductif au EDS, voir [36]). On oublie la dépendance éventuelle de b et σ par rapport à t , qui ne jouerait qu'un rôle mineur dans la suite. Si w est multidimensionnel, $\sigma(x)$ est une matrice.

Notons que si σ est constant, on a $x_t = y_t + \sigma w_t$ où y est solution de $dy_t = b(y_t - \sigma w_t)dt$ ce qui nous ramène au cas déterministe (toutefois la fonction $b_1(y, t) = b(y - \sigma w_t)$ est très irrégulière en t ce qui limite l'usage de méthodes déterministes d'ordre élevé).

VIII.2 Schémas d'intégration

Les deux mesures de vitesse de convergence Si $y_n \simeq x_{nh}$ est une approximation de la trajectoire de (VIII.1), La vitesse de convergence forte est donnée par le plus grand γ tel que :

$$E[|x_T - y_N|] = O(h^\gamma)$$

et la vitesse de convergence faible concerne la convergence des moments et est donnée par le plus grand β tel que :

$$|E[f(x_T)] - E[f(y_N)]| = O(h^\beta) \tag{VIII.2}$$

pour tout polynôme f (ou pour f assez régulière à support compact). Cette équation restera généralement valide pour les fonctions assez régulières.

Pour chaque méthode, des conditions de régularité spécifiques devront être imposées sur les fonctions b et σ pour que la vitesse propre à la méthode soit effectivement atteinte.

Schéma d'Euler. Il consiste à considérer les intégrands constants. On approxime donc

$$x_{t+h} = x_t + \int_t^{t+h} b(x_s)ds + \int_t^{t+h} \sigma(x_s)dw_s$$

par

$$x_{t+h} \simeq x_t + hb(x_t) + \sigma(x_t)(w_{nh+h} - w_{nh}).$$

Comme les variables $w_{nh+h} - w_{nh}$ sont normales indépendantes de variance h , on arrive au schéma

$$y_{n+1} = y_n + b(y_n)h + \sigma(y_n)\sqrt{h}\delta_n$$

où δ_n sont des variables i.i.d $\mathcal{N}(0, 1)$. Si b et σ dépendent de t , il faut bien entendu mettre $b(nh, y_n)$ et $\sigma(nh, y_n)$. L'ordre fort est $\gamma = 0,5$ et l'ordre faible est $\beta = 1$.

Méthode de Romberg. Contrairement au cas déterministe, les schémas deviennent très rapidement extrêmement compliqués. Si l'on cherche un bon ordre en loi, une alternative est d'utiliser la méthode de Romberg : partir d'un schéma simple (Euler) et le faire fonctionner pour différentes valeurs de h (on a donc des trajectoires simulées $x_t^{k,h}$) puis extrapoler polynomialement (en polynôme de h) les espérances obtenues $e(h) = \frac{1}{K} \sum_k f(x_t^{k,h})$ pour trouver la valeur en $h = 0$ (la méthode se base donc sur l'existence d'un développement de Taylor en h pour $E[f(x_t^{k,h})]$).

Schéma de Milstein. En raison du terme brownien, d'ordre \sqrt{h} , le schéma d'Euler n'a un ordre fort que de 0,5. Une façon de corriger cela est d'avancer plus loin dans le développement de sorte à arriver jusqu'à l'ordre h . On est naturellement conduit à une approximation plus fine de x_s dans la deuxième intégrale :

$$\begin{aligned} x_{t+h} &\simeq x_t + hb(x_t) + \int_t^{t+h} \sigma(x_t + \sigma(x_t)(w_s - w_t))dw_s \\ &\simeq x_t + hb(x_t) + \int_t^{t+h} (\sigma(x_t) + \sigma'(x_t)\sigma(x_t)(w_s - w_t))dw_s \\ &\simeq x_t + hb(x_t) + \sigma(x_t)(w_{t+h} - w_t) + \sigma'(x_t)\sigma(x_t) \int_t^{t+h} (w_s - w_t)dw_s \\ &= x_t + hb(x_t) + \sigma(x_t)(w_{t+h} - w_t) + \sigma'(x_t)\sigma(x_t)((w_{t+h} - w_t)^2 - h)/2 \end{aligned} \quad (\text{VIII.3})$$

(car $2 \int_0^t w_s dw_s = w_t^2 - t^2$) d'où

$$y_{n+1} = y_n + b(y_n)h + \sigma(y_n)\sqrt{h}\delta_n + \sigma(y_n)\sigma'(y_n)(\delta_n^2 - 1)h/2.$$

Ceci n'est valide que s'il n'y a qu'un brownien car en dimension supérieure on voit intervenir des termes de la forme $\int_t^{t+h} (w_s - w_t)dw'_s$, où w' est un second brownien indépendant ; or ils sont inconnus. Il faut donc se procurer des réalisations des intégrales stochastiques et utiliser (VIII.3).

L'ordre fort comme l'ordre faible vaut 1.

Un schéma de Runge et Kutta. Ces schémas sont très vite extrêmement compliqués¹. Présentons un des plus simples

$$\begin{aligned} x_n^+ &= x_n + \frac{2}{3}(b_s(x_n)h + \sigma(x_n)\sqrt{h}\delta_n), & b_s &= b - \sigma\sigma'/2 \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{4}(b_s(x_n) + 3b_s(x_n^+)) + \frac{\sqrt{h}}{4}(\sigma(x_n) + 3\sigma(x_n^+))\delta_n. \end{aligned}$$

Compléments. On peut, sans changer l'ordre faible, remplacer les δ_n gaussiennes standard par d'autres variables centrées réduites. Par exemple un Bernoulli, ou encore la variable δ , telle que $P(\delta = \sqrt{3}) = P(\delta =$

1. K. Burrage, P.M. Burrage, "High strong order explicit Runge-Kutta methods for stochastic ordinary differential equations", *Applied Numerical Mathematics*, 22, 81-101 (November 1996).

$-\sqrt{3}) = 1/6$ et $P(\delta = 0) = 2/3$ (dont les moments sont ceux de la gaussienne jusqu'à l'ordre 4). Remarquer que dans le cas du Bernoulli, les schémas de Milstein et Euler coïncident, ceci explique pourquoi ils ont même ordre faible.

L'équation (VIII.2) restera souvent valide même pour des fonctions f non-régulières pourvu que la simulation soit faite avec des variables normales.

Il existe des schémas d'ordre supérieur, R-K, et implicites ; ils ont très vite des expressions assez compliquées, pas toujours généralisables au cas multidimensionnel ; nous renvoyons à [24].

VIII.3 Exercices de simulation. Exemples

Martingale exponentielle. Le processus $x_t = \exp((b - \sigma^2/2)t + \sigma w_t)$ satisfait

$$dx_t = bx_t dt + \sigma x_t dw_t.$$

Si $b = 0$, c'est une martingale qui tend p.s vers 0. Noter qu'ici on a pour Euler et Milstein respectivement :

$$y_{n+1} = y_n(1 + bh + \sigma\sqrt{h}\delta_n)$$

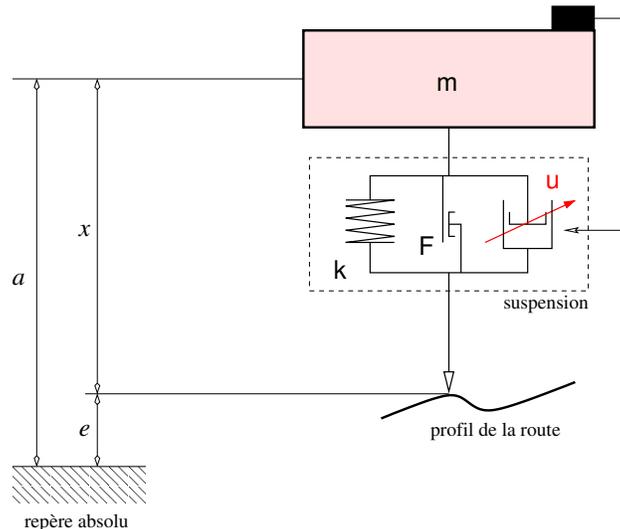
$$y_{n+1} = y_n(1 + bh + \sigma\sqrt{h}\delta_n + \sigma^2 h(\delta_n^2 - 1)/2).$$

Vérifier expérimentalement la vitesse de convergence forte pour $b = 1/2, \sigma = 1, T = 1$: On calculera par Monte-Carlo $E[|x_1 - y_N|^2]$ pour différentes valeurs de h (par exemple $h = 0, 1^p, p = 2 + k/2, k = 0, \dots, 4$), points que l'on portera sur un graphique log-log ; pour le Monte Carlo, on fera environ une centaine de tirages pour chaque valeur de h . On comparera ainsi Euler et Milstein.

Amortisseur. L'équation est

$$m\ddot{x}_t + u\dot{x}_t + kx_t + F\text{signe}(\dot{x}_t) = -m\ddot{e}_t$$

avec des valeurs typiques² $m = 60$ (kg), $k = 3500$ (N/m), $F = 40$ (N).



2. S. Bellizzi, R. Bouc, F. Campillo, et E. Pardoux, "Contrôle optimal semi-actif de suspension de véhicule." In A. Bensoussan and J.L. Lions, editors, *Analysis and Optimization of Systems*, Antibes 1988, volume 111 of Lecture Notes in Control and Information Sciences, pages 689-699. INRIA, Springer Verlag, 1988.

La masse typique de 60 kg vient du fait qu'en réalité la suspension est sous le siège du conducteur, si bien que e_t est en fait le profil amorti.

La quantité u (liée au diamètre du trou qui laisse passer l'huile) peut être commandée en fonction de x_t et \dot{x}_t qui sont facilement mesurés, le but étant de minimiser le désagrément du conducteur mesuré par la valeur moyenne de $(u\dot{x} + kx_t + F\text{signe}(\dot{x}_t))^2$ (noter que si cette quantité est nulle, l'ordonnée liée au conducteur $x + e$ est constante). On propose une commande de la forme

$$u(x, \dot{x}) = m(\theta_1 + \theta_2 x \text{signe}(\dot{x}))_+.$$

On suppose de plus que \dot{e}_t est correctement représenté par un mouvement brownien : $\dot{e}_t = -\sigma w_t$ (valeur typique $\sigma = 0.5$). Finalement, en posant $y = \dot{x}$, et $\alpha = k/m, \beta = F/m$

$$\begin{aligned} dx_t &= y_t dt \\ dy_t &= (-\theta_1 + \theta_2 x \text{signe}(y_t))_+ y_t - \alpha x_t - \beta \text{signe}(y_t) dt + \sigma dw_t = b(x_t, y_t) dt + \sigma dw_t. \end{aligned}$$

Des simulations permettent d'estimer les meilleures valeurs pour $\theta = (\theta_1, \theta_2)$, c.-à-d. celles qui minimisent $E[b(x_t, y_t)^2]$ en régime stationnaire. On trouve une valeur voisine de $\theta = (2, 200)$.

Oscillateur de Duffing-Van der Pol. On part de l'équation déterministe³

$$\ddot{x} + \dot{x}(\beta - \beta_1 x^2) - (\alpha - \alpha_1 x^2)x = 0.$$

Si le système est excité par un bruit aléatoire, on ajoute un bruit blanc au membre de gauche (« dérivée » virtuelle du mouvement brownien $\xi_t dt = dw_t$) et l'équation devient

$$\ddot{x}_t + \dot{x}_t(\beta - \beta_1 x_t^2) - (\alpha - \alpha_1 x_t^2)x_t = \sigma \xi_t.$$

En notant $y = \dot{x}$, le processus vectoriel (x, y) satisfait

$$\begin{aligned} dx_t &= y_t dt \\ dy_t &= -y_t(\beta - \beta_1 x_t^2) dt + (\alpha - \alpha_1 x_t^2)x_t dt + \sigma dw_t. \end{aligned}$$

On pourra simuler les situations

$$\alpha = \alpha_1 = \beta = 1, \quad \beta_1 = 0, \quad \sigma \in \{0; 0, 2; 0, 5\}, \quad T = 8, \quad x_0 \in [-4; -2], \quad y_0 = 0$$

et l'on regardera, en particulier quand σ grandit, le comportement au voisinage des attracteurs -1 et 1 en traçant x seulement, avec T de l'ordre de 100 (ou 1000; pour aller vite, ne pas prendre h trop petit).

Pont brownien. Il s'agit de $x_t = w_t - tw_1$. On vérifie que $x_t - \int_0^t \frac{x_s}{1-s} ds$ est un mouvement brownien et donc sa loi coïncide avec celle de

$$dx_t = -\frac{x_t}{1-t} dt + dw_t.$$

Observer par simulation qu'en dépit de la singularité en $t = 1$ le comportement semble assez bon.

Dynamique des populations (proie/prédateur). Equations de Lotka-Volterra. L'équation déterministe est $\dot{x} = (\lambda - \mu x)x$ qui exprime que pour une population x petite (c.-à-d. $\mu x \ll \lambda$), le nombre de naissances moins le nombre de morts est proportionnel à x ($\lambda > 0$), mais quand x approche de λ/μ , le manque de ressources se fait sentir, impliquant une décroissance quand x dépasse cette valeur. Noter les deux points stationnaires et remarquer que 0 est instable si $\lambda > 0$ et stable sinon. Les aléas sur les ressources font que λ est aléatoire, et est remplacé par $\lambda + \sigma \xi_t$ où ξ_t est un bruit blanc. On obtient

$$dx_t = (\lambda - \mu x_t)x_t dt + \sigma x_t dw_t.$$

3. L. Arnold, *Random dynamical systems*, Springer, 1998.

Le modèle déterministe simple pour deux espèces dont une est le prédateur de l'autre est $\dot{x} = ax - byx$, $\dot{y} = -cy + dxy$. Noter que $z = dx - c \log x + by - a \log y$ est une intégrale première (c.-à-d. $\dot{z} = 0$). Plus généralement un modèle vectoriel pour plusieurs espèces est

$$dx_i = (\lambda_i + \sum \mu_{ij}x_j)x_i dt + \sigma_i x_i dw_t$$

où $\lambda_i + \mu_{ii}x_i$ est la vitesse de croissance en absence d'autre espèce, et μ_{ij} est positif si i est prédateur de j , négatif sinon, et nul si les espèces s'ignorent (matrice antisymétrique en signe). Exemple à trois populations :

$$\begin{aligned} dx_1 &= (a_1 - b_{11}x_1 - b_{12}x_2)x_1 dt + \sigma_1 x_1 dw_t \\ dx_2 &= (-a_2 + b_{21}x_1 - b_{22}x_2 - b_{23}x_3)x_2 dt + \sigma_2 x_2 dw_t \\ dx_3 &= (-a_3 + b_{32}x_2 - b_{33}x_3)x_3 dt + \sigma_3 x_3 dw_t. \end{aligned}$$

Les a_i et b_{ij} sont positifs. Noter que des λ_i peuvent être négatifs (espèce prédatrice qui ne peut survivre seule). On laisse le lecteur interpréter les signes.

Modèle de Heston. Il s'agit d'une amélioration du modèle de Black-Scholes où la volatilité v_t du prix S_t de l'actif est elle-même modélisée par un processus stochastique⁴ :

$$\begin{aligned} dS_t &= \mu S_t dt + \sqrt{v_t} S_t dw_t \\ dv_t &= -\gamma(v_t - \theta) dt + k\sqrt{v_t} dw'_t \end{aligned}$$

où w_t et w'_t sont deux mouvements browniens indépendants.

VIII.4 Techniques spécifiques de simulation

VIII.4.1 Échantillonnage préférentiel

Tout est basé sur le théorème de Girsanov qui implique que les deux processus à condition initiale déterministe

$$\begin{aligned} dx_t &= b(x_t)dt + \sigma(x_t)dw_t, \\ dy_t &= (b(y_t) + \sigma(y_t)h(y_t))dt + \sigma(y_t)dw_t, \quad y_0 = x_0 \end{aligned}$$

satisfont pour toute fonction mesurable bornée $f(x) = f(x_t, 0 \leq t \leq T)$

$$E[f(x)] = E[f(y)e^{-\int_0^T h(y_t)dw_t - \frac{1}{2}\int_0^T \|h(y_t)\|^2 dt}].$$

b, σ et h peuvent dépendre de t également. Il suffit pour cela d'avoir existence et unicité en loi de la solution en x et que $|h(x)| \leq C(|x| + 1)$ [22]. On peut alors choisir h de sorte à favoriser certaines trajectoires, par exemple $h(x) = -\lambda x$ si l'on veut calculer $P(|x_T| < \varepsilon)$; voir le § III.1 pour les détails pratiques.

L'échantillonnage préférentiel est également utilisé pour simuler des trajectoires conditionnellement à leur valeur en certains points. En effet ce problème de simulation est généralement difficile mais possède une solution simple dans le cas où b est une fonction affine de x et σ est constant, car le processus est gaussien de structure connue simple; le théorème de Girsanov permet de s'y ramener dès que σ est une matrice carrée inversible constante, et également dans certaines autres circonstances. Nous référons à l'article en note pour les détails et les applications à l'estimation⁵.

4. L'article de G. Daniel, D.S. Brée et N.L. Joseph, "A goodness-of-fit for the Heston model", donne une première approche intéressante de ce modèle pour un statisticien. Voir www.cs.man.ac.uk/~dbree/goodness-of-fit-Heston-Model.pdf

5. B. Delyon, Y. Hu, "Simulation of conditioned diffusions and applications to parameter estimation", *Stochastic Processes and Application*, 116, no. 11, 1660-1675. 2006.

VIII.4.2 Importance splitting

C'est simplement l'application de l'exercice III.8.7. Par exemple pour calculer la loi de $x = (x_t)_{0 \leq t \leq T}$ sachant $A = \{\sup_{t \leq T} |x_t| > K\}$, on simulera N_0 trajectoires, on considèrera ensuite celles pour lesquelles le seuil $K_1 = K/2$ (par exemple) est dépassé et pour toutes ces dernières on refera N_1 simulations partant du temps d'atteinte de ce seuil ; on sélectionne ensuite parmi ces dernières celles qui atteignent un seuil $K_2 = 2K/3 \dots$. On a alors l'estimée (III.2) de $E[f(x)1_A]$ avec $X = f(x)$.

IX

BOOTSTRAP

IX.1 Introduction

Soit $T(y_1, \dots, y_n)$ une statistique basée sur n observations, par exemple un estimateur d'un certain paramètre, ou encore, un estimateur d'un moment des y_i (supposés indépendantes et de même loi). On cherche à avoir de l'information sur la distribution de cette statistique, par exemple

1. variance
2. intervalles de confiance
3. fonction de répartition

Une méthode pourrait consister à faire une estimation de la densité de y pour en déduire ensuite les informations nécessaires sur la distribution de T . Cette façon de faire est toutefois difficile à réaliser et coûteuse.

Les méthodes considérées ici consistent à estimer par simulation cette distribution. Comme la loi de y n'est pas connue, il faut l'approcher.

Les références [13], [14] et [21] contiennent de nombreux exemples et détails pratiques et [29] est une excellente étude plus approfondie.

IX.2 Estimation par répétitions (bootstrap paramétrique)

On est ici nécessairement dans un cadre paramétrique. On se donne donc une famille de lois P_θ , et une suite d'observations $Y = (y_1, \dots, y_n)$, indépendantes, de loi P_{θ^0} chacune; θ^0 est le paramètre inconnu. Soit $\hat{\theta}(Y)$ un estimateur de θ^0 .

Si θ^0 était connu, on pourrait simuler d'autres suites d'échantillons sous la loi P_{θ^0} , disons $Y_k = (y_1^k, \dots, y_n^k)$, $k = 1, \dots, K$, et observer la distribution empirique des $\hat{\theta}(Y_k)$. On aurait par exemple un estimateur de la variance de $\hat{\theta}(Y)$ avec la formule

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K (\hat{\theta}(Y_k) - \theta^0)^2.$$

Comme θ^0 est inconnu, on peut procéder de la façon suivante : simuler d'autres suites $Y_k = (y_1^k, \dots, y_n^k)$ sous la loi $P_{\hat{\theta}(Y)}$ et observer la distribution des $\hat{\theta}(Y_k)$. On a par exemple un estimateur de la variance σ^2 de $\hat{\theta}(Y)$

avec la formule

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K (\hat{\theta}(Y_k) - \hat{\theta}(Y))^2.$$

Noter qu'on a mis ici $\hat{\theta}(Y)$ car c'est la valeur du vrai paramètre dans le cas où la distribution est $P_{\hat{\theta}(Y)}$. Cette méthode est clairement basée sur les hypothèses

1. Exactitude du modèle : les y_i suivent effectivement la loi P_{θ^0} .
2. Régularité et proximité : la statistique recherchée (ici σ^2) est une fonction suffisamment régulière de θ^0 , et $\hat{\theta}(Y)$ est suffisamment proche de θ^0 .

IX.3 Principes de base du bootstrap

Cette méthode a l'avantage de fonctionner même dans un cadre **non-paramétrique**. Elle est simplement basée sur le principe de base de l'estimation : remplacer une fonction de la vraie distribution (inconnue) par la même fonction appliquée à la distribution empirique. Pour fixer les idées, donnons-nous l'exemple suivant où l'on estime le moment d'ordre de 4 des y_i supposés de même loi

$$T(Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i^4, \quad T^0 = E[y_1^4] = \lim_{n \rightarrow \infty} T(Y).$$

Pour bien comprendre le bootstrap, il faut interpréter $T(y_1, \dots, y_n)$ comme une fonction de la répartition empirique F_n des données :

$$F_n(x) = \frac{1}{n} \#\{i : y_i \leq x\}.$$

En effet, la donnée de F_n est équivalente à celle de l'échantillon Y . On utilisera alors l'abus de notations : $T(Y) = T(F_n)$; dans l'exemple plus haut on a $T(F_n) = \int y^4 dF_n(y)$. $T(F_n)$ est une estimée de $T^0 = T(F)$, limite quand n tend vers l'infini, car F_n tend vers F en norme uniforme (théorème de Glivenko-Cantelli) et T sera supposée continue pour cette métrique (condition généralement satisfaite).

Le bootstrap consiste à produire des « échantillons indépendants » de T en faisant **comme si la distribution empirique des y_i était la vraie distribution** des y_i :

- Générer un échantillon $Y^* = (y_1^*, \dots, y_n^*)$ en effectuant n tirages uniformes avec remise dans $\{y_1, \dots, y_n\}$
- $T(Y^*)$ est un échantillon de la statistique.

Ayant ainsi produit un grand nombre d'échantillons Y^1, \dots, Y^B on peut par exemple estimer l'écart quadratique moyen entre $T(Y)$ et T^0 par

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B (T(Y^b) - T(Y))^2.$$

Pour une région de confiance, soit ε tel que 95% des $T(Y^b)$ satisfassent

$$T(Y) \in [T(Y^b) - \varepsilon, T(Y^b) + \varepsilon]$$

alors on considèrera que l'intervalle

$$[T(Y) - \varepsilon, T(Y) + \varepsilon]$$

est une région de confiance pour T^0 de niveau approximatif 5%. Noter que le passage se fait de la façon suivante :

	échantillons		paramètres	
monde de départ	Y	$T(Y)$	T^0	F
monde bootstrappé	Y^b	$T(Y^b)$	$T(Y)$	F_n

et l'on calcule sous F_n (monde bootstrappé) ce que l'on veut connaître sous F .

Avantages et inconvénients du bootstrap. Il sont essentiellement :

1. La simplicité du principe. Permet d'éviter des calculs de variance (asymptotique) plus ou moins inextricables.
2. Des résultats expérimentaux assez bons en divers domaines, par exemple en régression non-paramétrique [20], ou en calibration d'intervalles de confiance¹, même sur des échantillons de taille modeste.
3. Des théorèmes démontrant la validité des approximations jusqu'au deuxième ordre en la taille de l'échantillon. Ceci explique le point précédent.
4. Même si l'on connaît bien la loi asymptotique de $T(Y) - T^0$ correctement normalisé, il est fréquent qu'il n'y ait pas d'expression explicite pour sa densité ou sa variance, ce qui rend difficile l'exploitation de cette information. Le bootstrap permet de contourner ce problème.
5. Un inconvénient : Le bootstrap n'est sûr que dans un cadre où l'approximation gaussienne est valide ; de plus les valeurs extrêmes dans le monde réel et le monde bootstrappé ont a priori des distributions très différentes². Ceci signifie que dans l'exemple ci-dessus, il faut que $\sqrt{n}(T(Y) - T^0)$ tende en loi vers une gaussienne et que l'on ne peut prendre ε d'un ordre inférieur à $1/\sqrt{n}$. Voir cependant le § IX.6.4.

Un mot de la théorie. Un résultat théorique général typique est que sous certaines hypothèses de régularité de T (considérée comme fonction de F)³ alors les v.a. $E = \sqrt{n}(T(F_n) - T(F))$ tendent en loi vers $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $\sigma > 0$ et pour (presque) tout Y , les $E^b = \sqrt{n}(T(F_n^b) - T(F_n))$ ont la même limite en loi (rappelons l'abus de notation : $T(Y)$ pour $T(F_n)$, et $T(Y^b)$ pour $T(F_n^b)$). Cependant cette propriété n'est pas forcément très passionnante, car on peut souvent estimer σ sans trop de problème.

D'autres résultats (voir [29] p.19 et chap.5, ou [21] § 2.6), assurent que la loi E^b est proche de celle E à un *ordre meilleur* que l'approximation gaussienne⁴ ; malheureusement, cette proximité n'est garantie en général que pour des versions plus sophistiquées du bootstrap, comme le bootstrap avec « normalisation pivotale » (§ IX.6.3), ou le bootstrap régularisé en régression non-paramétrique (exercice IX.7.3) [20], ou encore le double bootstrap⁵.

Voir aussi le § IX.6.4 pour le cas non asymptotiquement gaussien.

En pratique, une méthode de bootstrap devra toujours être validée par des simulations.

1. P. Hall, L. Peng, "On prediction intervals based on predictive likelihood or bootstrap methods", *Biometrika*, 86, 4, 871-880, 1999.

2. A.T.A. Wood, "Bootstrap relative errors and subexponential distributions", *Bernoulli*, 6(5), 2000, 809-834.

3. On demandera l'existence d'une certaine fonction $\varphi(x)$ à variation totale finie, appelée fonction d'influence, telle que pour toute fonction de répartition G ,

$$T(G) = T(F) + E_G[\varphi(y)] + o(\|G - F\|_\infty).$$

On a alors $\sigma^2 = \text{Var}(\varphi(Y))$. En particulier, T doit varier peu si l'on perturbe la distribution de y par une masse de Dirac ($G = (1 - \varepsilon)F + \varepsilon 1_{\geq x_0}$).

4. Voir aussi P. Hall, S.R. Wilson, "Two guidelines for bootstrap hypothesis testing", *Biometrics*, 47(2) :757-762, 1991.

5. Pour le traitement complet d'un exemple simple consulter l'article J.G. Booth, P. Hall, "Monte Carlo approximation and the iterated bootstrap", *Biometrika*, vol 81, No 2, 331-340, 1994.

IX.4 Exemples

Calibration d'une région de confiance. Les régions de confiance pour les estimateurs sont de la forme :

$$\mathcal{R}_\alpha = \{\theta : \varphi(\theta, \hat{\theta}) < \lambda\}$$

où typiquement $\varphi(\theta, \hat{\theta}) = (\theta - \hat{\theta})^T S (\theta - \hat{\theta})$ pour une certaine matrice S et $\lambda = \chi_p^2(\alpha)$. Malheureusement, cette région n'est bien de niveau α que si le nombre d'échantillon est suffisamment élevé. Le bootstrap permet d'évaluer autrement la valeur de λ pour laquelle cette région est de niveau α . En effet, le niveau de confiance de la région estimé par bootstrap sera simplement donné par la proportion de $\hat{\theta}_b^*$ tels que $\varphi(\hat{\theta}, \hat{\theta}_b^*) < \lambda$. On peut donc régler λ de sorte à avoir un niveau donné.

Distribution de la médiane (ou autre...). On veut savoir la loi de $m_Y - m^0$ où m_Y est la médiane empirique des y_i et m^0 la médiane de leur distribution. Pour cela, on observera simplement la loi de $m_{Y_b^*} - m_Y$ quand Y^b est un échantillon bootstrappé (et que Y est fixe, puisque c'est l'observation). Dans le deuxième tracé de la figure IX.1 on a superposé la fonction de répartition de $m_Y - m^0$ (calculée théoriquement) et celle $m_{Y_b^*} - m_Y$ (calculée empiriquement).

Régression non-paramétrique adaptative. C'est une situation où il faut choisir un estimateur parmi une infinité indexée par un paramètre. On observe :

$$y_i = f(x_i) + \xi_i$$

où les (x_i, ξ_i) sont i.i.d. et f est inconnue. On a par exemple l'estimateur à noyau

$$\hat{f}_h(x) = \frac{\sum_i p_i y_i}{\sum_i p_i}, \quad p_i = K\left(\frac{x - x_i}{h}\right).$$

On cherche h de sorte à minimiser l'erreur de prédiction $E[(y - \hat{f}_h(x))^2]$ où l'espérance porte sur la paire (x, y) de distribution F (distribution commune aux (x_i, y_i)) ainsi que sur les (x_i, y_i) implicites dans l'estimateur. Le choix de h est rarement facile⁶. L'estimateur par bootstrap de cette erreur est

$$c(h) = \frac{1}{nB} \sum_{b=1}^B \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{f}_h^b(x_i))^2$$

où \hat{f}_h^b est l'estimateur de f basé sur un échantillon bootstrappé de (x_i, y_i) :

$$\hat{f}_h^b(x) = \frac{\sum_i p_i^b y_i^b}{\sum_i p_i^b}, \quad p_i^b = K\left(\frac{x - x_i^b}{h}\right).$$

On choisira donc la valeur de h qui minimise $c(h)$. Cette méthode est la plus rustique ; on préfère généralement utiliser un bootstrap régularisé (exercice IX.7.3).

Estimation de densité. On aura cette fois $\hat{p}_h(x) = \frac{1}{nh} \sum_i K\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$ et l'on minimisera

$$c(h) = \frac{-1}{nB} \sum_{i=1}^n \sum_{b=1}^B \log \hat{p}_h^b(x_i) \quad \text{où} \quad \hat{p}_h^b(x) = \frac{1}{nh} \sum_i K\left(\frac{x - x_i^b}{h}\right).$$

Le log est simple et naturel pour illustrer le propos mais n'est pas très bon, et il est meilleur en pratique d'utiliser les estimées habituelles du risque quadratique⁷ ; le critère est alors

$$E \int (\hat{p}_h(x) - p(x))^2 dx = E \int \hat{p}_h(x)^2 dx - 2E \int \hat{p}_h(x) p(x) dx + cst \tag{IX.1}$$

6. W. Härdle, P. Hall, J.S. Marron, "How Far Are Automatically Chosen Regression Smoothing Parameters From Their Optimum", *J. Amer. Statist. Assoc.* 83 (1988), no. 401, 86-101.

7. Pour un exposé concis sur les estimateurs généraux de h , on pourra consulter l'article : M.C. Jones, J.S. Marron, S.J. Sheater, "A Brief Survey of Bandwidth Selection for Density Estimation", *J. Amer. Statist. Assoc.* 91 (1996), no. 433, 401-407.

ce qui donne à minimiser

$$c(h) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \left(\int \widehat{p}_h^b(x)^2 dx - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \widehat{p}_h^b(x_i) \right).$$

IX.5 Échec du bootstrap dans un cas non-régulier

Considérons l'estimation des quantiles : $T(F) = \max\{x : F(x) < \alpha\}$. On a ici $\sqrt{n}(T(F_n) - T(F)) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, avec $\sigma^2 = \alpha(1 - \alpha)$. La figure IX.1 montre deux expériences faites avec $\alpha = 1$ et $\alpha = 1/2$.

Dans le cas où $0 < \alpha < 1$, tout va bien. Sinon, l'expérience n'est pas régulière et la bonne normalisation pour $T(F_n) - T(F)$ est n et non pas \sqrt{n} ; dans ce cas on n'obtient pas la distribution asymptotique de $n(T(F_n) - T(F))$ en calculant celle de $n(T(F_n^b) - T(F_n))$.

Faisons le lien avec la note page 111. On montre sans grande difficulté que si F est dérivable et de dérivée strictement positive en $T(F)$, alors il y a dérivabilité et la fonction d'influence vaut

$$\varphi(x) = F'(T(F))^{-1}(\alpha - 1(x < T(F))).$$

En particulier on voit que si $\alpha = 1$ (estimation du maximum du support de la distribution et $T(Y) = T(F_n) = \sup_i y_i$), les ennuis commencent, surtout si F admet une dérivée nulle en $F^{-1}(1)$, auquel cas φ est infini; on peut également vérifier que T n'est pas une fonction continue au voisinage de F , en effet

$$\text{si } T(F) = \theta \text{ alors } \forall \varepsilon > 0, T((1 - \varepsilon)F + \varepsilon\delta_{\theta+1}) = \theta + 1.$$

Un autre exemple d'échec du bootstrap est celui des U -statistiques : $T = \sum_{i,j} H(y_i, y_j)$, où H est une certaine fonction, cf [29] p. 37.

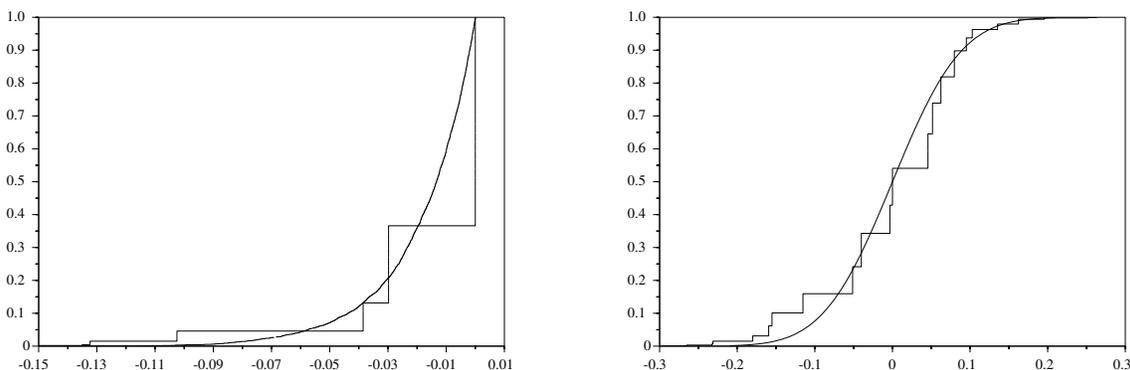


FIGURE IX.1 – L'échantillon $Y = (y_1, \dots, y_n)$ consiste en 50 tirages de la loi uniforme sur $[0, 1]$. $T(Y) = \sup(y_i)$. La première figure représente la fonction de répartition de la distribution de $T(Y) - T(F_Y) = T(Y) - 1$ obtenue théoriquement et son estimation par bootstrap. On retrouve la valeur $e^{-1} \simeq 0,37$ qui est la probabilité asymptotique qu'un sous-échantillon de taille n tiré uniformément dans $\{y_1, \dots, y_n\}$ ne contienne pas le plus grand élément de cet échantillon. Sur la seconde figure l'expérience est la même sauf que cette fois-ci T est la médiane.

IX.6 Variantes et détails pratiques

IX.6.1 Bootstrap régularisé.

Ce n'est rien d'autre que le remplacement de la loi de bootstrap par une loi estimée, le but étant de réduire la variance dans certaines expressions. On peut estimer cette loi dans un cadre paramétrique ou non-paramétrique. Il faut que le biais d'estimation soit faible.

Cette approche a été utilisée en estimation de densité (Faraway & Jhun, 1990) : le critère (IX.1) devient

$$c(h) = E \int \widehat{p}_h(x)^2 dx - 2E \int \widehat{p}_h(x) \widehat{p}_{h_0}(x) dx$$

où l'espérance est prise pour des échantillons tirés sous l'estimée préalable \widehat{p}_{h_0} . En remplaçant p_h par son expression, on obtient une formule assez explicite qui fait intervenir les convoluées du noyau⁸, ce qui évite les simulations. Afin de ne pas introduire de biais, il faut prendre h_0 assez petit, par exemple obtenu à l'issue d'une méthode de validation croisée qui minimisera le critère analogue :

$$c_v(h) = \int \widehat{p}_h(x)^2 dx - \frac{2}{n} \sum_i \widehat{p}_h^{(i)}(x_i)$$

où $\widehat{p}_h^{(i)}$ désigne l'estimateur obtenu sur la base de l'échantillon privé de x_i .

Pour un autre exemple (estimateur de Grenander), voir [41].

IX.6.2 Bootstrap semi-paramétrique.

Dans un modèle paramétrique de la forme

$$y_i = f(\theta^0, x_i) + u_i$$

où les x_i sont déterministes, plutôt que de faire le bootstrap direct des données (ce qui peut paraître assez injustifié puisque les régresseurs sont généralement considéré comme déterministes), on préférera estimer θ^0 , puis les u_i puis générer les données bootstrappées :

$$y_i^b = f(\widehat{\theta}, x_i) + u_i^b$$

où les u_i^b sont tirés uniformément dans l'ensemble des $\widehat{u}_i = y_i - f(\widehat{\theta}, x_i)$.

La version dite du wild bootstrap consiste à prendre $u_i^b = \widehat{u}_i v_i^b$ où les v_i^b sont i.i.d. de variance 1.

Si l'échantillon est modeste, on peut préférer générer les u_i par leave-one-out : $\widehat{u}_i = y_i - f(\widehat{\theta}^{(i)}, x_i)$, où $\widehat{\theta}^{(i)}$ est l'estimée obtenue en excluant la paire (x_i, y_i) des données.

IX.6.3 Normalisation pivotale.

Cette méthode améliore souvent considérablement les performances du bootstrap. Elle est tout-à-fait recommandée dans les cas réguliers, voir [21] § 2.6 pour l'explication théorique. Le point est de modifier la statistique T de sorte que sa distribution soit asymptotiquement indépendante de F : moins T dépend de F , plus le bootstrap apporte d'amélioration.

8. P. Hall, J.S. Marron, B.U. Park, "Smoothed cross-validation", *Probab. Th. Relat. Fields*, 92,1-20, 1992. pour une comparaison avec la validation croisée.

Pour un exemple en estimation non paramétrique, voir N. NEUMEYER, H. DETTE, "Nonparametric comparison of regression curves", *The Annals of Statistics*

Soit $\hat{\sigma}(Y)$ un estimateur (non-nécessairement précis) de la variance de $T(Y)$. Alors la loi de $(T(Y) - T(F_y))/\hat{\sigma}(Y)$ peut être approchée par la loi empirique de $(T(Y^b) - T(Y))/\hat{\sigma}(Y^b)$. Ceci conduit à l'approximation en loi

$$T(Y) - T(F_y) \sim \frac{\hat{\sigma}(Y)}{\hat{\sigma}(Y^b)}(T(Y^b) - T(Y))$$

dans le membre de gauche c'est Y qui varie, et dans celui de droite, c'est bien entendu Y^b et Y est fixé. Cette méthode conduit à des **intervalles de confiance** pour $T(F_y)$, qui sont de la forme $[T(Y) - \delta_1 \hat{\sigma}(Y), T(Y) + \delta_2 \hat{\sigma}(Y)]$.

IX.6.4 Bootstrap par sous-échantillonnage

Dans cette méthode, Y^b est un sous-échantillon de Y de longueur $l_n < n$, obtenu par tirage sans remise. On montre que si l_n n'est pas trop grand, on pourra estimer la distribution $T(Y) - T^0$ dans un cadre très général, comprenant même le contre-exemple du paragraphe précédent. En effet, si

$$\begin{aligned} l_n &\longrightarrow \infty \\ \frac{l_n}{n} &\longrightarrow 0 \\ \tau(n)(T(Y) - T^0) &\longrightarrow \mathcal{D} \quad \text{en distribution} \end{aligned}$$

où \mathcal{D} est une certaine loi et $\tau(n)$ est la vitesse de convergence (dans les cas réguliers \mathcal{D} est gaussienne et $\tau(n) = \sqrt{n}$), alors, pour presque tout ω ,

$$\tau(l_n)(T(Y^*) - T(Y)) \longrightarrow \mathcal{D} \quad \text{en distribution.}$$

Ceci signifie que pour tout point x de continuité de \mathcal{D}

$$\Phi_n(x/\tau(l_n)) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \mathbf{1}_{(T(Y^b) - T(Y)) \leq x/\tau(l_n)} \longrightarrow P(\mathcal{D} \leq x) \quad (\text{IX.2})$$

où la somme est étendue aux $B = C_n^{l_n}$ sous-échantillons de Y ⁹.

Si cette méthode est plus robuste que le simple bootstrap, on peut vérifier qu'en revanche la convergence vers \mathcal{D} est moins rapide dans les cas réguliers¹⁰.

La valeur $l_n = n^{2/3}$ est souvent recommandée. Cette méthode est donc très bonne pour obtenir au moins la forme de la distribution; en effet, le facteur d'échelle $\tau(n)$ est a priori inconnu. Pour le cas où $\tau(n) = n^\alpha$, P. Bertail¹¹ propose une méthodologie pour estimer α qui donne, après report dans (IX.2), une estimée consistante de la fonction de répartition de \mathcal{D} . L'idée est simplement de calculer $\Phi_n(x)$ pour différents choix de l_n et de voir pour quel α les courbes $\Phi_n(l_n^{-\alpha}x)$ se superposent.

IX.7 Exercices et compléments

Exercice IX.7.1 (Estimation de biais) Proposer une méthode de bootstrap pour estimer le biais $E[T(Y) - T(F_y)]$ de l'estimateur T .

9. Pour un énoncé plus précis consulter : D.N. Politis, J.P. Romano, "Large Sample Confidence Regions based on Subsamples under Minimal Assumptions" *Ann. Stat.*, 1994, Vol 22, No 4, 2013-2050.

En particulier, dans l'énoncé précédent, la convergence n'a en réalité pas lieu presque sûrement mais en probabilité, à moins d'affiner l'hypothèse de décroissance de l_n/n .

10. P. Bertail, "Second order properties of an extrapolated bootstrap without replacement under weak assumptions", *Bernoulli* 3(2), 1997, 149-179.

11. P. Bertail, D.N. Politis, J.P. Romano, "On subsampling estimators with unknown rate of convergence", *J. Amer. Statist. Assoc.* 94 (1999), No 446, 569-579.

Exercice IX.7.2 (Rapport de vraisemblance empirique) Soit G une fonction de répartition associée à une mesure portant les y_i , ce que l'on notera $G \ll F_n$. Si les poids correspondants sont p_i , on définira le rapport de vraisemblance

$$R(G) = 2n \sum p_i^0 \log(p_i^0/p_i)$$

où les p_i^0 sont les poids donnés par F_n (généralement $1/n$). Owen¹² a montré que l'on a asymptotiquement sous certaines hypothèses de régularité

$$\inf \{R(G); T(G) = T(F_y), G \ll F_n\} \sim \chi^2$$

(si $T(G) \in \mathbb{R}^p$, on trouve un χ_p^2). Ceci conduit aux intervalles de confiance asymptotiques

$$T(F_y) \in \{T(G); R(G) \leq c, G \ll F_n\}$$

avec le niveau $1 - F_{\chi^2}(c)$.

1. Proposer une méthode de bootstrap pour réestimer le niveau.
2. On suppose que l'on dispose d'une méthode raisonnable pour estimer F_y . Proposer une méthode de simulation pour réestimer le niveau.

Exercice IX.7.3

Proposer une méthode de bootstrap régularisé en régression non-paramétrique $y_i = f(x_i) + \xi_i$ (on supposera les x_i *déterministes*) : il s'agit de partir d'une estimée pilote \hat{f}_0 , d'en déduire des $\hat{\xi}_i$, puis fabriquer des échantillons bootstrappés en tirant des $\hat{\xi}_i^b$.

12. A.B. Owen, "Empirical Likelihood ratio confidence intervals", *Biometrika*, vol.75, No.2, 237-249, 1988.

A

FILTRE DE KALMAN

Soit un système dont l'évolution est donnée par les équations

$$x_{k+1} = A_k x_k + v_k \tag{A.1}$$

$$y_k = C_k x_k + w_k \tag{A.2}$$

où (v_k, w_k) est un bruit blanc gaussien

$$(v_k, w_k) \sim \mathcal{N}\left(0, \begin{pmatrix} Q_k & R_k \\ R_k^T & S_k \end{pmatrix}\right).$$

On se donne également la loi de x_0 :

$$x_0 \sim \mathcal{N}(\hat{x}_0, P_0).$$

Le filtre de Kalman permet de prédire les x_k au vu des observations y_k . On peut le voir comme un calcul d'espérance conditionnelles ou bien comme la solution d'un problème de moindres carrés, comme on l'a mentionné page 72. Il se résume au résultat suivant :

On suppose $R_k = 0$. La loi de x_k sachant $(y_1, y_2 \dots y_{k-1})$, ou $(y_1, y_2 \dots y_k)$ est gaussienne. Les variables

$$\hat{x}_k^- = E[x_k | y_{k-1}, y_{k-2} \dots]$$

$$\hat{x}_k = E[x_k | y_k, y_{k-1} \dots]$$

satisfont

$$\hat{x}_k = \hat{x}_k^- + K_k(y_k - C_k \hat{x}_k^-) \quad (\text{correction}) \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{x}_{k+1}^- = A_k \hat{x}_k \quad (\text{prédiction}) \quad (\text{A.4})$$

où les matrices K_k et

$$P_k = E[(\hat{x}_k - x_k)(\hat{x}_k - x_k)^T | y_k, y_{k-1} \dots]$$

$$P_{k+1}^- = E[(\hat{x}_{k+1}^- - x_{k+1})(\hat{x}_{k+1}^- - x_{k+1})^T | y_k, y_{k-1} \dots]$$

satisfont la récursion

$$P_k = (I - K_k C_k) P_k^- \quad (\text{A.5})$$

$$K_k = P_k^- C_k^T (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} \quad (\text{A.6})$$

$$P_{k+1}^- = A_k P_k A_k^T + Q_k. \quad (\text{A.7})$$

Si $R_k \neq 0$, les formules (A.4) et (A.7) deviennent

$$\hat{x}_{k+1}^- = A_k \hat{x}_k + R_k (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} (y_k - C_k \hat{x}_k^-)$$

$$P_{k+1}^- = A_k P_k A_k^T + Q_k - (A_k P_k^- C_k^T + R_k) (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} (A_k P_k^- C_k^T + R_k)^T.$$

Les estimées lissées

$$\tilde{x}_n = E[x_n | y_1, \dots, y_N]$$

peuvent se déduire des estimées filtrées, par le filtrage arrière de Rauch-Tung-Striebel :

$$\tilde{x}_n = \hat{x}_n + P_n A_n^T (P_{n+1}^-)^{-1} (\tilde{x}_{n+1} - \hat{x}_{n+1}^-), \quad \tilde{x}_N = \hat{x}_N. \quad (\text{A.8})$$

NOTE : Si l'évolution de x dans (A.1) est $x_{k+1} = A_k x_k + u_k + v_k$ avec u_k connu, il faut simplement remplacer (A.4) par $\hat{x}_{k+1}^- = A_k \hat{x}_k + u_k$.

Démonstration: Rappelons que si

$$Y = CX + e$$

où e est indépendant de X , et C est une matrice de dimension appropriée alors on a

$$E[X|Y] = m_x + R_{xy} R_{yy}^{-1} (Y - C m_x) = m_x + R_{xx} C^T (C R_{xx} C^T + R_{ee})^{-1} (Y - C m_x)$$

$$R_{xx|y} = R_{xx} - R_{xy} R_{yy}^{-1} R_{yx} = R_{xx} - R_{xx} C^T (C R_{xx} C^T + R_{ee})^{-1} C R_{xx}.$$

Soulignons qu'il est remarquable que la matrice $R_{xx|y}$ ne dépende pas de y .

Les équations (A.3, A.5, A.6) sont les mêmes que celles-ci, avec $Y = y_k$, $X = x_k$, $e = w_k$, $R_{xx} = P_k^-$,

$R_{xx|y} = P_k$ et $E[.]$ désigne ici $E[. | y_{k-1}, y_{k-2}, \dots]$ (donc $E[. | Y]$ désigne $E[. | y_k, y_{k-1}, \dots]$), si bien que $m_x = \widehat{x}_k^-$.

Les équations (A.4) et (A.7) sont élémentaires si R_k est nul.

Pour le cas $R \neq 0$, il faut noter que comme $v_k, y_k - \widehat{y}_k = y_k - C_k \widehat{x}_k^-$, et y_{k-1}, y_{k-2}, \dots sont orthogonaux, et que la variance de $y_k - C_k \widehat{x}_k^- = C_k(x_k - \widehat{x}_k^-) + w_k$ est $C_k P_k^- C_k^T + S_k$, on a

$$E[v_k | y_k, y_{k-1}, \dots] = E[v_k | y_k - C_k \widehat{x}_k^-, y_{k-1}, \dots] = E[v_k | y_k - C_k \widehat{x}_k^-] = R_k (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} (y_k - C_k \widehat{x}_k^-)$$

et donc la formule pour \widehat{x}_{k+1}^- s'ensuit ; pour la formule de P_{k+1}^- noter que

$$\begin{aligned} \widehat{x}_{k+1}^- - x_{k+1} &= A_k (\widehat{x}_k^- - x_k) + R_k (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} (y_k - C_k \widehat{x}_k^-) - v_k \\ &= A_k (\widehat{x}_k^- - x_k) + A_k K_k (y_k - C_k \widehat{x}_k^-) + R_k (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} (y_k - C_k \widehat{x}_k^-) - v_k \\ &= A_k (\widehat{x}_k^- - x_k) + (A_k P_k^- C_k^T + R_k) (C_k P_k^- C_k^T + S_k)^{-1} (y_k - C_k \widehat{x}_k^-) - v_k \end{aligned}$$

et en faisant passer le terme central dans le membre de gauche, on fait apparaître deux sommes de deux variables indépendantes, ce qui conduit au résultat lorsqu'on prend la variance.

On laisse (A.8) en exercice (difficile!). ■

Bibliographie

- [1] S. ARULAMPALAM, S. MASKELL, N. GORDON, T. CLAPP, “A tutorial on particle filters for on-line non-linear/non-gaussian bayesian tracking”, *IEEE-SP*, 50(2), 174-188, Feb 2002.
- [2] Y. ATCHADE, G. FORT, E. MOULINES, P. PRIOURET, “Adaptive Markov Chain Monte Carlo : Theory and Methods”, *Bayesian time series models*, 32–51, Cambridge Univ. Press, 2011.
- [3] N. BARTOLI, P. DEL MORAL, *Simulation et algorithmes stochastiques : une introduction avec applications*, Cépaduès , 2001.
- [4] A. BENVENISTE, M. MÉTIVIER, P. PRIOURET, *Adaptive Algorithms and Stochastic Approximations*, Springer–Verlag, 1990.
- [5] J. BESAG, “Spatial Interaction and the Statistical Analysis of Lattice Systems”, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, Vol. 36, No. 2, 192-236, 1974.
- [6] T. BODINEAU, *Modélisation de phénomènes aléatoires*, 2017.
www.cmap.polytechnique.fr/~bodineau/MAP432-Poly.pdf.
- [7] L. BREIMAN, *Probability*, Addison-Wesley, 1968.
- [8] T.M. COVER, J.A. THOMAS, *Elements of Information Theory, 2nd edition*, Wiley, 2006.
- [9] N. CRESSIE, *Statistics for spatial data*, Wiley, 1991.
- [10] L. DEVROYE, *Non-Uniform Random Variate Generation*, Springer, 1986. Voir aussi d’autres références sur cgm.cs.mcgill.ca/~luc/rng.html.
- [11] P.J. DIGGLE, *Statistical Analysis of Spatial point processes*, Academic Press, 1987.
- [12] M. DUFLO, *Algorithmes stochastiques*, Springer, 1996.
- [13] B. EFRON E. JOLIVET, R. HORDAN, *Le bootstrap et ses applications*, CSISIA, 1995.
- [14] B. EFRON, R.J. TIBSHIRANI, *An introduction to the bootstrap*, Chapman and Hall, 1993.
- [15] Y. EPHRAIM, N. MERHAV, “Hidden Markov processes”, *IEEE Trans. Inform. Theory*, vol. 48, . 1518-1569, June. Disponible depuis ece.gmu.edu/~yephraim.
- [16] G.S. FISHMAN, *Monte Carlo*, Springer 1997.
- [17] C. GAETAN, X. GUYON, *Modélisation et statistique spatiales*, Springer, 2008.
- [18] A. GELMAN & AL., *Bayesian Data Analysis*, Chapman & Hall, 2014.
- [19] P. HALL, C.C. HEYDE, *Martingale Limit Theory and Its Applications*, Academic Press, 1980.
- [20] W. HÄRDLE, *Applied nonparametric regression*, Cambridge University Press, 1990.
- [21] A.C. DAVISON, D.V. HINKLEY, *Bootstrap methods and their application*, Cambridge University Press, 1997
- [22] I. KARATZAS, S. SHREVE, *Brownian Motion and Stochastic Calculus*, 2d edition, Springer 1991.
- [23] J.F.C. KINGMAN, *Poisson processes*, Clarendon Press, 1993.
- [24] E. KLOEDEN, E. PLATEN, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, Springer, 1992.

- [25] D.E. KNUTH, *The Art of computer programming. Vol. 2*, Addison-Wesley , 1998.
- [26] P. L'ECUYER, "Random Number Generation", in *Handbook of Computational Statistics*, J.E. Gentle, W. Haerdle, and Y. Mori, eds., Springer, 2004. www.iro.umontreal.ca/~lecuyer/papers.html.
- [27] P. L'ECUYER, C. LEMIEUX, "Recent Advances in Randomized Quasi-Monte Carlo Methods", in *Modeling Uncertainty : An Examination of Stochastic Theory, Methods, and Applications*, M. Dror, P. L'Ecuyer, and F. Szidarovszki, eds., Kluwer Academic Publishers, 2002, 419-474. www.iro.umontreal.ca/~lecuyer/papers.html.
- [28] F. LEGLAND, "Filtrage particulière", 19ième Grets, septembre 2003. Disponible à l'adresse www.irisa.fr/sigma2/legland/pub/grets03.pdf.
- [29] E. MAMMEN, *When Does Bootstrap Work ?*, Springer, 1992.
- [30] X.-L. MENG, D. VAN DYK, "The EM Algorithm—An Old Folk-Song Sung to a Fast New Tune", *Journal of the Royal Statistical Society. Series B*, Vol. 59, No. 3. (1997), pp. 511-567.
- [31] J. MØLLER, R.P. WAAGEPETERSEN, *Statistical inference and simulation for spatial point processes*, Chapman, 2004.
- [32] A.A. MUCHNIK, A.L. SEMENOV AND V.A. USPENSKY "Mathematical metaphysics of randomness", *Theoret. Comput. Sci.* 207 (1998), No. 2, 263–317.
- [33] B.M. NEVEL'SON, R.Z. KHAS'MINSKII, *Stochastic Approximation and Recursive Estimation*, American Mathematical Society Translation of Math. Monographs, vol 47, 1976.
- [34] H. NIEDERREITER, *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*, CBMS-NSF Reg. Conf. Series in Appl.Math., Vol. 63, SIAM, 1992.
- [35] E. NUMMELIN, *General irreducible Markov chains and non-negative operators*, Cambridge University Press, 1984.
- [36] B. OKSENDAL, *Stochastic differential equations : an introduction with applications*, Springer, 1992.
- [37] L. RABINER, "A tutorial on Hidden Markov Models and selected applications in speech recognition", *Proc. IEEE*, 77(2) :257-286, Feb. 1989. Disponible sur divers sites internet.
- [38] C. ROBERT, G. CASELLA, *Méthodes de Monte-Carlo avec R*, Springer, 2011.
- [39] S.R. ROSS, *Simulation*, Academic Press, 1997.
- [40] G.N. SARIDIS, "Stochastic Approximation Methods for Identification and Control – A Survey", *IEEE-AC*, vol 19, No 6, décembre 1974.
- [41] B. SEN, M. BANERJEE, MOULINATH, M. WOODROOFE, Inconsistency of bootstrap : the Grenander estimator, *Ann. Statist.*, Vol. 38, No. 4, pp.1953–1977, 2010.
- [42] D. STOYAN, W.S. KENDALL, J. MECKE, *Stochastic Geometry and Its Applications*, Wiley, 1987.
- [43] W. ZUCCHINI, I.L. McDONALD, *Hidden Markov Models for Tome Series*, Chapman & Hall, 2009.