

Processus de Markov et applications

Algorithmes, Réseaux, Génome et Finance

É. Pardoux

11 septembre 2006

Table des matières

1	Monte Carlo	11
1.1	Description	12
1.2	Théorèmes de convergence	13
1.3	Simulation de variables aléatoires	18
1.4	Méthodes de réduction de variance	22
1.5	Exercices	26
2	Chaînes de Markov	33
2.1	Définition et propriétés élémentaires.	34
2.2	Exemples	37
2.2.1	Marche aléatoire sur $E = \mathbf{Z}^d$	37
2.2.2	Processus de Galton–Watson	38
2.2.3	File d’attente en temps discret	38
2.3	Propriété de Markov forte	39
2.4	Etats récurrents et transitoires	41
2.5	Le cas récurrent irréductible	44
2.6	Le cas apériodique	52
2.7	Chaîne de Markov réversible	58
2.8	Statistique des chaînes de Markov	60
2.9	Exercices	61
2.10	Problèmes corrigés	68
2.10.1	Enoncés	68
2.10.2	Corrigés	74
3	Algorithmes stochastiques	85
3.1	Méthode MCCM	85
3.1.1	Un cadre d’application	88
3.1.2	Le modèle d’Ising	90

3.1.3	Analyse bayésienne d'images	92
3.1.4	Chaînes chauffées	93
3.2	Simulation de la probabilité invariante	94
3.2.1	Simulation parfaite	95
3.2.2	Couplage depuis le passé	99
3.3	Vitesse de convergence	101
3.4	Le recuit simulé	105
3.5	Exercices	107
4	Chaînes de Markov et génome	111
4.1	Comment lire l'ADN?	111
4.1.1	Les îlots cpg	112
4.1.2	Recherche de gènes	113
4.2	Le modèle i.i.d	113
4.3	Le modèle de Markov	115
4.3.1	Application aux îlots cpg	115
4.3.2	Recherche de gènes	116
4.3.3	Statistique des chaînes de Markov Mk	117
4.3.4	Chaîne de Markov phasée	118
4.3.5	Chaîne de Markov localement homogène	118
4.4	Chaîne de Markov cachée	119
4.4.1	Calcul de la vraisemblance	121
4.4.2	L'algorithme de Viterbi	122
4.4.3	Estimation des paramètres	123
4.5	Modèle semi-markovien caché	129
4.5.1	Les limites du modèle de Markov caché	129
4.5.2	Chaîne semi-markovienne	130
4.5.3	Le modèle semi-markovien caché	131
4.5.4	Viterbi semi-markovien	132
4.5.5	Recherche de gènes	133
4.6	Alignement de deux séquences	136
4.6.1	Algorithme de Needleman–Wunsch	137
4.6.2	Chaîne de Markov cachée	138
4.6.3	Loi a posteriori de l'alignement	142
4.6.4	Probabilité a posteriori	144
4.7	Un algorithme d'alignement multiple	146
4.8	Exercices	148

5	Contrôle et filtrage	149
5.1	Contrôle optimal déterministe	149
5.2	Contrôle des chaînes de Markov	151
5.3	Contrôle optimal linéaire quadratique	152
5.4	Filtrage des chaînes de Markov	154
5.5	Le filtre de Kalman–Bucy	156
5.5.1	Motivation	156
5.5.2	Solution du problème	158
5.6	Contrôle avec observation partielle	161
5.7	Exercices	163
6	Le processus de Poisson	165
6.1	Processus ponctuels et f.a. de comptage	165
6.2	Le processus de Poisson	166
6.3	Propriété de Markov	170
6.4	Comportement asymptotique	174
6.5	Exercices	176
7	Processus markoviens de saut	181
7.1	Généralités	181
7.2	Générateur infinitésimal	186
7.3	Propriété de Markov forte	189
7.4	Chaîne de Markov incluse	192
7.5	Classification des états	195
7.6	Le cas irréductible récurrent	197
7.7	Réversibilité	202
7.8	Phylogénie	203
7.8.1	Modèles d'évolution	206
7.8.2	Vraisemblance en phylogénie	212
7.8.3	L'approche bayésienne en phylogénie	216
7.9	Application aux EDP discrétisées	219
7.10	Le recuit simulé (suite)	221
7.11	Exercices	228
7.12	Problèmes corrigés	230
7.12.1	Énoncés	230
7.12.2	Corrigés	234

8	Files d'attente et réseaux	239
8.1	File d'attente M/M/1	240
8.2	File d'attente M/M/1/K	242
8.3	File d'attente M/M/s	243
8.4	File d'attente M/M/s/s	246
8.5	Atelier de réparation	246
8.6	Files d'attente en série	247
8.7	File d'attente M/G/ ∞	248
8.8	File d'attente M/G/1	249
8.8.1	Une chaîne incluse	249
8.8.2	Le cas récurrent positif	250
8.9	Réseau de Jackson ouvert	252
8.10	Réseau de Jackson fermé	257
8.11	Réseau téléphonique	259
8.12	Réseau de Kelly	263
8.12.1	Une seule file d'attente	263
8.12.2	Réseau multi-classe	267
8.13	Exercices	268
9	Mathématiques financières	271
9.1	Les concepts de fondamentaux	272
9.1.1	Option	272
9.1.2	Arbitrage	273
9.1.3	Marchés viables et complets	274
9.2	Options européennes dans le modèle discret	275
9.2.1	Le modèle	275
9.2.2	Stratégie admissible	275
9.2.3	Martingales	277
9.2.4	Le marché est viable et complet	278
9.2.5	Prix du call et du put	281
9.2.6	La formule de Black–Scholes	281
9.3	Le modèle et la formule de Black–Scholes	284
9.3.1	Introduction au calcul stochastique	284
9.3.2	Équations différentielles stochastiques	292
9.3.3	Formule de Feynman–Kac	294
9.3.4	L'EDP de Black–Scholes	295
9.3.5	La formule de Black–Scholes (2)	297
9.3.6	Généralisation du modèle de Black–Scholes	298

9.3.7	La formule de Black–Scholes (3)	299
9.3.8	Le théorème de Girsanov	302
9.3.9	Propriété de Markov et EDP	303
9.3.10	Option portant sur plusieurs sous-jacent	305
9.3.11	Viabilité et Complétude	308
9.3.12	Remarques sur le calcul effectif	308
9.3.13	Volatilité implicite	310
9.4	Options américaines	310
9.4.1	Enveloppe de Snell	312
9.4.2	Décomposition de Doob	314
9.4.3	Enveloppe de Snell et chaînes de Markov	316
9.4.4	Retour aux options américaines	316
9.4.5	Options américaines et options européennes	317
9.4.6	Options américaines et modèle markovien	318
9.5	Options américaines	318
9.6	Taux d'intérêt et obligations	319
9.6.1	Courbe de taux en avenir certain	320
9.6.2	Taux et obligations	320
9.6.3	Option sur obligation	323
9.6.4	Un modèle de taux d'intérêt	324
9.7	Exercices	326
	Bibliographie	329
	Index	333

Préface

Les briques de base de ce manuel sont le chapitre 1 sur les méthodes de Monte Carlo, le chapitre 2 sur les chaînes de Markov en temps discret à valeurs dans un ensemble fini ou dénombrable, et les chapitres 6 et 7 sur le processus de Poisson et les processus markoviens de sauts, qui sont des processus en temps continu, à nouveau à valeurs dans un ensemble fini ou dénombrable.

A partir de ces bases, ce manuel présente des applications de ces outils probabilistes dans plusieurs domaines. Le chapitre 3 traite d’algorithmes stochastiques. Il s’agit d’une part de la méthode de Monte Carlo par chaînes de Markov inventée dans les années 50 pour la mécanique statistique, utilisée en traitement d’images, et qui est devenue l’outil de calcul indispensable en statistique bayésienne, dès que les données à traiter sont complexes. Il s’agit d’autre part d’un algorithme d’optimisation, à savoir le recuit simulé.

Une autre application concerne la biologie moléculaire, avec deux aspects bien distincts. L’un, présenté au chapitre 4, concerne l’annotation des séquences d’ADN (autrement dit la recherche de gènes) et l’alignement des séquences. L’outil principal est ici les chaînes de Markov cachées, qui est par ailleurs une technique utilisée dans bien d’autres domaines que la biologie moléculaire (en particulier en traitement du signal et en reconnaissance de la parole). Une seconde application en biologie a trait à la phylogénie, qui est l’étude des relations entre espèces vivantes, ces relations s’illustrant en particulier par un “arbre phylogénétique”. Plusieurs des méthodes de construction de tels arbres font appel à des modèles probabilistes d’évolution sur l’arbre en question. Il s’agit de modèles de processus markoviens de sauts. Cette application est traitée dans le chapitre 7.

Auparavant, le chapitre 5 présente une introduction au contrôle et au filtrage, avec en particulier une présentation du célèbre filtre de Kalman–Bucy, un algorithme très utilisé en particulier dans le guidage des fusées et

des satellites.

Le chapitre 8 présente une application des processus markoviens de sauts aux files d'attente et aux réseaux (informatiques, téléphoniques, etc.).

Enfin le chapitre 9 donne une introduction aux mathématiques financières, partant des modèles discrets, avec un traitement des modèles continus, y compris une présentation du calcul stochastique d'Itô et des processus de diffusion, qui sont encore des processus de Markov, mais cette fois à la fois en temps continu, et à valeurs dans l'espace euclidien \mathbb{R}^d .

Chaque chapitre est suivi d'un certain nombre d'exercices. Certains de ces exercices sont suivis de la mention (en gras) *Programmation*. Cela veut dire qu'ils proposent de réaliser des simulations, par exemple sous Matlab, avec le plus souvent visualisation des résultats sous forme de courbes. Enfin les chapitres 2 et 7 se terminent par des problèmes corrigés.

Ce livre a commencé à exister comme polycopié de divers cours, en deuxième et troisième année d'Ecole d'ingénieurs (tout d'abord à l'Ecole Supérieure de Mécanique de Marseille, puis à l'EGIM/Ecole Centrale de Marseille) et à l'Université de Provence, en DESS, puis en Master. Il contient la matière pour plusieurs cours sur les chaînes et processus markoviens et leurs applications, qui doivent pouvoir être suivis par des étudiants en Master de Mathématiques et Applications, et des élèves d'Ecoles d'Ingénieurs. Le contenu convient à des cours de second semestre de M1, et des options de M2. Il peut aussi être utilisé avec profit par des étudiants préparant l'option "Probabilités-Statistique" à l'oral de l'agrégation de Mathématiques.

La lecture complète de cet ouvrage (en particulier celle du chapitre 9) suppose que le lecteur a acquis le niveau d'un cours de probabilités basé sur la théorie de la mesure, y compris la notion d'espérance conditionnelle, tel qu'enseigné normalement au premier semestre du Master 1 de Mathématiques. Cependant, une très grosse partie de l'ouvrage ne fait appel qu'aux lois discrètes, et à quelques lois à densité, ainsi qu'aux théorèmes limites usuels (loi des grands nombres et théorème de la limite centrale). Tout ce matériel est normalement enseigné au cours des années de Licence de Mathématiques, et en première année de nombreuses Ecoles d'Ingénieurs.

Je remercie Geneviève Foissac qui a assuré l'essentiel de la dactylographie de ce texte, et mes Collègues Julien Berestycki, Fabienne Castell, Yuri Golubev, Arnaud Guillin et Laurent Miclo, qui ont relu certaines portions de cet ouvrage, et m'ont fait des remarques et critiques qui m'ont permis d'améliorer le manuscrit original.

Marseille, Septembre 2006.

Chapitre 1

Simulations et méthode de Monte Carlo

Introduction

Pour donner une première idée de la méthode de Monte Carlo, nous allons considérer un problème d'intégration numérique. Il existe de très nombreuses méthodes d'approximation de l'intégrale :

$$\int_{[0,1]} f(x)dx$$

par des formules du type $\sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$, avec les w_i qui sont des nombres positifs dont la somme vaut 1 et les x_i sont des points de l'intervalle $[0, 1]$. Par exemple, lorsque $w_0 = w_n = 2/n$, $w_i = 1/n$ sinon, les points $x_i = i/n$ étant régulièrement répartis, on a affaire à la méthode des trapèzes. Mais il existe bien d'autres méthodes comme la méthode de Gauss ou de Simpson. Une méthode de Monte Carlo est du même type : on choisit $w_i = 1/n$ et l'on tire les x_i "au hasard" (mais pas n'importe comment, il faut tirer les points selon la loi uniforme sur $[0, 1]$). Comme on le verra ci-dessous, la convergence est assurée par la loi des grands nombres, et la vitesse de convergence, de l'ordre de K/\sqrt{n} , est donnée par le théorème de la limite centrale. Evidemment, cette vitesse de convergence peut paraître faible si on la compare aux autres méthodes d'intégration en dimension 1. Mais toutes ces méthodes numériques s'effondrent lorsque la dimension augmente. En effet, dans toutes ces méthodes, la précision est fonction de la distance entre deux

points voisins de discrétisation. Mais si l'on utilise n points de discrétisation de $[0, 1]^d$, la distance entre deux points voisins est de l'ordre de $n^{-1/d}$, donc pour assurer une précision de l'ordre de $1/n$ pour une méthode d'"ordre 1" d'approximation d'une intégrale sur $[0, 1]^d$, il faut de l'ordre de n^d points de discrétisation. Par contre la méthode de Monte Carlo est insensible à la dimension.

Historiquement, la méthode remonte au comte de Buffon qui, en 1777, a décrit une méthode de calcul de π basée sur la réalisation d'expériences répétées. Mais la vraie naissance de la méthode de Monte Carlo est liée à l'apparition des premiers ordinateurs et à leurs utilisations dans le cadre des projets secrets du département de la défense des Etats Unis dans les années 40 – 45. Les premiers articles décrivant ce type de méthodes datent de la fin des années 40 et du début des années 50. Ces méthodes numériques sont maintenant de plus en plus utilisées, à cause de leur facilité de programmation, et de la possibilité de réaliser en un temps raisonnable un nombre gigantesque de "tirages aléatoires" sur les ordinateurs modernes.

1.1 Description de la méthode

Pour utiliser une méthode de Monte Carlo, on doit tout d'abord mettre sous forme d'espérance la quantité que l'on cherche à calculer. C'est souvent simple, comme pour le cas d'un calcul d'intégrale, mais ça peut être plus compliqué, comme lorsque l'on cherche à résoudre une équation aux dérivées partielles parabolique ou elliptique (cf. les sections 7.9 et 9.3). Nous reviendrons longuement par la suite sur cette étape dans des cas particuliers.

A l'issue de cette étape, il nous reste à calculer une quantité de la forme $\mathbb{E}(X)$, où X est une variable aléatoire. Pour pouvoir calculer $\mathbb{E}(X)$, il convient de savoir simuler des variables aléatoires indépendantes X_1, \dots, X_N , ayant toutes la loi de X . Il ne reste plus alors qu'à approximer $\mathbb{E}(X)$ par :

$$\mathbb{E}(X) \approx \frac{1}{N}(X_1 + \dots + X_N).$$

On va donner un exemple d'application de la méthode de Monte Carlo, au cas du calcul d'une intégrale, en détaillant les deux étapes citées : mise sous forme d'espérance et simulation de la variable aléatoire.

Imaginons que l'on cherche à calculer une intégrale de la forme :

$$I = \int_{[0,1]^d} f(u_1, \dots, u_d) du_1 \dots du_d.$$

On pose, $X = f(U_1, \dots, U_d)$, où les U_1, \dots, U_d sont des variables aléatoires indépendantes suivant une loi uniforme sur le cube $[0, 1]^d$. On a :

$$\mathbb{E}(X) = \mathbb{E}(f(U_1, \dots, U_d)) = \int_{[0,1]^d} f(u_1, \dots, u_d) du_1 \dots du_d,$$

par définition de la loi du n -uplet, (U_1, \dots, U_d) . On vient de réaliser la première étape (mise sous forme d'espérance).

Pour la simulation, supposons que $(U_i, i \geq 1)$ est une suite de variables aléatoires indépendantes suivant une loi uniforme sur $[0, 1]$ (obtenue par des appels successifs à une fonction `random`) et posons $X_1 = f(U_1, \dots, U_d)$, $X_2 = f(U_{d+1}, \dots, U_{2d})$, etc. Alors la suite $(X_i, i \geq 1)$ est une suite de variables aléatoires indépendantes suivant toutes la loi de X . On est en mesure d'appliquer une méthode de Monte Carlo.

Une remarque importante est la très grande facilité de programmation de la méthode. Il est à noter aussi que cette méthode ne dépend pas de la régularité de f , qui peut être simplement mesurable.

Souvent, on cherche à évaluer une intégrale dans \mathbb{R}^n , plus générale, du type :

$$I = \int_{\mathbb{R}^n} g(x)f(x)dx = \int_{\mathbb{R}^n} g(x_1, \dots, x_n)f(x_1, \dots, x_n)dx_1 \dots dx_n,$$

avec $f(x)$ positive et $\int f(x)dx = 1$. Alors I s'écrit sous la forme $\mathbb{E}(g(X))$ si X est une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^n de loi $f(x)dx$. Le problème est alors de savoir comment simuler une variable aléatoire selon cette loi. Pour beaucoup de lois usuelles, c'est simple (loi gaussienne, loi exponentielle, ...).

Nous allons maintenant répondre à deux questions :

- Quand et pourquoi cet algorithme converge-t-il ?
- Quelle idée peut on se faire de la précision de l'approximation ?

1.2 Théorèmes de convergence

La réponse à ces deux questions est donnée par deux des théorèmes les plus importants du calcul des probabilités, la loi forte des grands nombres qui permet de justifier la convergence de la méthode et le théorème de la limite centrale qui précise la vitesse de convergence.

Loi forte des grands nombres et méthode de Monte Carlo

Théorème 1.2.1. *Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes suivant toutes la même loi qu'une variable aléatoire X . On suppose que $\mathbb{E}(|X|) < +\infty$, alors, pour presque tout ω (cela signifie qu'il existe $N \subset \Omega$, avec $\mathbb{P}(N) = 0$ et que si $\omega \notin N$) :*

$$\mathbb{E}(X) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n}(X_1 + \cdots + X_n).$$

Ce théorème impose une limite théorique aux méthodes de Monte Carlo : on ne peut l'utiliser que pour des variables aléatoires intégrables (ce n'est pas vraiment surprenant).

Théorème de la limite centrale et méthode de Monte Carlo Pour avoir une idée de l'intérêt de la méthode il faut être en mesure d'évaluer l'erreur :

$$\varepsilon_n = \mathbb{E}(X) - \frac{1}{n}(X_1 + \cdots + X_n).$$

Le théorème de la limite centrale donne un asymptotique de l'erreur ε_n mais de nature aléatoire. Il dit que la loi de ε_n finit par ressembler à une loi gaussienne centrée.

Théorème 1.2.2. *Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes suivant toutes la même loi qu'une variable aléatoire X . On suppose que $\mathbb{E}(X^2) < +\infty$. On note σ^2 la variance de X :*

$$\sigma^2 = \mathbb{E}(X^2) - \mathbb{E}(X)^2 = \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2),$$

alors :

$$\frac{\sqrt{n}}{\sigma} \varepsilon_n \text{ converge en loi vers une gaussienne centrée réduite } Z.$$

Cela signifie que pour tout $a < b$,

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{P}\left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}}a \leq \varepsilon_n \leq \frac{\sigma}{\sqrt{n}}b\right) = \int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}.$$

En pratique, dès que n n'est pas trop petit (ce qui est toujours le cas dans les calculs de Monte Carlo), la probabilité ci-dessus est pratiquement égale à sa limite, donc on remplace ε_n par une gaussienne centrée de variance σ^2/n .

Remarque 1.2.3. *Ce résultat est extrêmement positif, puisqu'il donne presque toujours une vitesse de convergence facilement estimable à l'aide des tirages déjà réalisés.*

C'est une grande force de la méthode de donner une approximation fiable de l'erreur, sans pratiquement aucun calcul supplémentaire.

Remarque 1.2.4. *Cependant, le théorème de la limite centrale ne permet jamais de borner l'erreur, puisque le support de la gaussienne est égal à \mathbb{R} en entier. On présente souvent l'erreur de la méthode de Monte Carlo soit en donnant l'écart type de ε_n , c'est à dire σ/\sqrt{n} , soit en donnant un intervalle de confiance à 95% pour le résultat. Ceci signifie que le résultat cherché se trouve avec 95% de chance dans l'intervalle donné (et avec 5% de chance en dehors, ce qui ne rassure pas!). Evidemment, la valeur de 95% peut être remplacée par n'importe quelle autre valeur proche de 1.*

Notons l'importance de la variance de la variable aléatoire X dans l'estimation de l'erreur. Comme on a le choix de la loi de X pourvu que $\mathbb{E}(X)$ reste constant, il est tentant de remplacer la variable aléatoire X par une autre de même espérance mais de variance inférieure. On appelle ce type de technique technique de réduction de variance (voir la section 1.4).

Il faut aussi noter que la vitesse de convergence de l'erreur n'est pas excellente. Cependant, il existe des cas où cette méthode lente est malgré tout la meilleure accessible (intégrale ou équation parabolique en dimension plus grande que 4, ...). Il est aussi remarquable que la vitesse de convergence de la méthode, pour des calculs d'intégrale, ne dépende pas de la régularité de f .

Nous allons donner deux exemples d'utilisation du théorème de la limite centrale. Nous verrons que ce résultat impose des limites pratiques à la méthode de Monte Carlo.

Un cas confortable Supposons, que l'on cherche à calculer $p = \mathbb{P}(f(U) \leq \lambda)$. On va poser $X = \mathbf{1}_{\{f(U) \leq \lambda\}}$, avec U v. a. de loi quelconque. Alors $\mathbb{E}(X) = p$, et $\sigma^2 = \text{var}(X) = p(1-p)$. Donc, à l'issue de n tirages indépendants selon la loi de X , X_1, \dots, X_n on a :

$$p_n = \frac{X_1 + \dots + X_n}{n} \approx p + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}Z.$$

Comme $p(1-p) \leq 1/4$, si l'on veut faire une erreur moyenne $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ de l'ordre de 0.01 sur la valeur de p , il convient de prendre n de l'ordre de 2500. Si l'on

choisit, $n = 2500$, l'intervalle de confiance à 95% pour p est alors, en utilisant le théorème de la limite centrale $[p_n - 1.96 * 0.01, p_n + 1.96 * 0.01]$. Si la valeur de p à estimer est de l'ordre 0.50 ceci conduit à une erreur acceptable.

Par contre lorsque la valeur de p à estimer est très faible le nombre de tirages précédent peut être insuffisant pour évaluer son ordre de grandeur par simulation (puisque'il faut que l'ordre de grandeur de l'erreur soit inférieur à celui de la quantité à évaluer). On doit (et c'est intuitivement évident) prendre un nombre de tirages nettement supérieur à $1/p$.

Un cas difficile Imaginons que l'on cherche à calculer $\mathbb{E}(\exp(\beta Z))$, où Z est une gaussienne centrée réduite. Il est facile de vérifier que :

$$E = \mathbb{E}(e^{\beta Z}) = e^{\frac{\beta^2}{2}}.$$

Si l'on applique dans ce cas une méthode de Monte Carlo, on pose $X = e^{\beta Z}$. La variance de X vaut $\sigma^2 = e^{2\beta^2} - e^{\beta^2}$. Au bout de n tirages selon la loi de X , X_1, \dots, X_n on a :

$$E_n = \frac{X_1 + \dots + X_n}{n} \approx E + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}Z.$$

L'erreur relative moyenne est de l'ordre de $\frac{\sigma}{E\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{e^{\beta^2}-1}{n}}$. Si l'on se fixe un ordre de grandeur de l'erreur ε à respecter, on voit qu'il convient de choisir $n \approx \varepsilon^{-2}(e^{\beta^2} - 1)$. Si $\varepsilon = 1$ et $\beta = 5$, cela donne $n = 7 \times 10^{10}$, ce qui est beaucoup (et même trop!). Par exemple, dans le cas $\beta = 5$, la valeur exacte est de l'ordre de 27×10^4 , et après 10^5 tirages, on pourra obtenir comme valeur estimée une quantité de l'ordre de 85×10^4 , avec comme intervalle de confiance à 95% $[-467647, 2176181]$. Le seul côté rassurant est que l'on est au courant de ce que l'approximation est très mauvaise.

Cet exemple montre une des limites pratiques de la méthode de Monte Carlo lorsqu'on utilise des variables aléatoires de variance grande, et donc conduit à formuler une :

Règle : dans tout calcul de Monte Carlo, on doit systématiquement estimer à l'aide des simulations réalisées la variance de la v.a. dont on cherche à approcher l'espérance.

Un exemple plus concret Dans les applications à la finance (cf. ci-dessous le chapitre 9), on est amené à calculer des quantités du type :

$$C = \mathbb{E}\left(\left(e^{\sigma Z} - K\right)_+\right), \quad (1.1)$$

Z étant une gaussienne centrée réduite et $x_+ = \max(0, x)$. Ces quantités représentent le prix d'une option d'achat appelée call. Evidemment, dans le cas précis cité on peut trouver une formule explicite (pour l'essentiel c'est la célèbre formule de Black et Scholes; mais on verra ci-dessous des cas où il n'y a guère d'alternative à la méthode de Monte Carlo) :

$$\mathbb{E} \left((e^{\sigma Z} - K)_+ \right) = e^{\sigma^2/2} F \left(\sigma - \frac{\log(K)}{\sigma} \right) - KF \left(-\frac{\log(K)}{\sigma} \right), \quad (1.2)$$

avec

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-u^2/2} du.$$

Mais nous allons ici supposer que l'on cherche à calculer ces quantités par simulation, soit

$$C \simeq N^{-1} \left[(e^{\sigma Z_1} - K)_+ + \dots + (e^{\sigma Z_N} - K)_+ \right].$$

Supposons maintenant que l'on cherche à évaluer une option de vente appelée put, c'est à dire :

$$P = \mathbb{E} \left((K - e^{\sigma Z})_+ \right), \quad (1.3)$$

donc

$$P \simeq N^{-1} \left[(K - e^{\sigma Z_1})_+ + \dots + (K - e^{\sigma Z_N})_+ \right].$$

Il est assez clair que

$$\text{Var} \left[(K - e^{\sigma Z})_+ \right] < \text{Var} \left[(e^{\sigma Z} - K)_+ \right],$$

et puisque l'on a la "formule de parité call-put

$$C - P = e^{-\sigma^2/2} - K,$$

il vaut mieux calculer P par Monte Carlo, et utiliser la formule de parité call-put pour obtenir C , plutôt que de calculer directement C par Monte Carlo (cf. l'exercice 1.5.10 ci-dessous).

Nous venons d'indiquer une "méthode de réduction de variance". Nous passerons en revue la plupart de ces méthodes à la section 1.4.

1.3 Simulation de variables aléatoires

Simulation d'une loi uniforme sur $[0, 1]$ Tous les langages de programmation des ordinateurs possèdent un générateur de nombres *pseudo-aléatoires*. Il s'agit d'un programme qui génère une suite de nombres parfaitement déterministe, et en plus périodique, mais dont les propriétés statistiques lui donnent beaucoup de caractéristiques de la réalisation d'une suite de v. a. indépendantes, toutes de loi uniforme sur $[0, 1]$. La difficulté est de construire en un temps de calcul raisonnable une formule de récurrence qui génère une suite que les tests statistiques acceptent comme étant une suite i. i. d. de loi uniforme sur $[0, 1]$, avec une période aussi grandes que possibles. L'étude de ces algorithmes relève de la théorie des systèmes dynamiques. On trouvera une présentation des algorithmes classiques de génération de nombre pseudo-aléatoires dans [26] et [37] notamment. Plus récemment, Matsumoto et Nishimura [29] ont proposé un générateur de période $2^{19937} - 1$!

Il reste à examiner comment simuler les lois usuelles, sachant que l'on sait simuler des v. a. de loi uniforme.

Inversion de la fonction de répartition Rappelons le résultat très classique :

Lemme 1.3.1. *Soit X une v. a. r. de fonction de répartition F continue. Posons, pour $0 \leq t \leq 1$,*

$$F^{-1}(t) = \inf\{x, F(x) \geq t\}.$$

Alors si U suit la loi $\mathcal{U}[0, 1]$, $F^{-1}(U)$ a même loi que X .

PREUVE On utilise la définition $F(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$. Alors

$$\mathbb{P}(F^{-1}(U) \leq x) = \mathbb{P}(U \leq F(x)) = F(x).$$

□

Donc chaque fois que l'on a une formule explicite pour l'inverse de la fonction de répartition, cette méthode est utilisable. C'est en particulier le cas pour la loi exponentielle.

Simulation d'une loi exponentielle Rappelons qu'une variable aléatoire X suit une loi exponentielle de paramètre λ si et seulement si pour tout $t \in \mathbb{R}$,

$$\mathbb{P}(X > t) = \exp(-\lambda t).$$

Donc si F désigne la fonction de répartition de X , $F(t) = 1 - e^{-\lambda t}$, et

$$F^{-1}(x) = -\frac{\log(1-x)}{\lambda}.$$

Si $U \simeq \mathcal{U}[0, 1]$, il en est de même de $1 - U$, et

$$-\frac{\log U}{\lambda} \simeq \mathcal{E}(\lambda).$$

Simulation de variables gaussiennes (Algorithme de Box–Müller) Une méthode classique pour simuler les variables aléatoires gaussiennes repose sur la constatation que, si U et V sont deux variables aléatoires uniformes sur $[0, 1]$ indépendantes :

$$\sqrt{-2 \log(U)} \cos(2\pi V) \quad \text{et} \quad \sqrt{-2 \log(U)} \sin(2\pi V)$$

sont indépendantes et de loi $N(0, 1)$. Ce résultat se vérifie par exemple comme suit. Si X et Y sont indépendantes et de loi $N(0, 1)$, $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}_+$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}f(X, Y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) f(x, y) dx dy \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) f(r \cos \theta, r \sin \theta) dr d\theta \\ &= \int_0^1 \int_0^1 f\left(\sqrt{-2 \log u} \cos(2\pi v), \sqrt{-2 \log u} \sin(2\pi v)\right) du dv \\ &= \mathbb{E}f\left(\sqrt{-2 \log U} \cos(2\pi V), \sqrt{-2 \log U} \sin(2\pi V)\right) \end{aligned}$$

Pour simuler une gaussienne de moyenne μ et de variance σ^2 , il suffit de poser $X = \mu + \sigma Y$, où $Y \simeq N(0, 1)$.

Simulation d'une variable aléatoire poissonnienne Une variable aléatoire de loi de Poisson de paramètre λ est une variable à valeurs dans \mathbb{N} telle que :

$$\mathbb{P}(X = n) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!}, \quad \text{si } n \geq 0$$

On verra au chapitre 6 que si $\{T_i, i \geq 1\}$ est une suite de variables aléatoires indépendantes, de loi exponentielle de paramètre λ , alors la loi de $N_t = \sum_{n \geq 1} n \mathbf{1}_{\{T_1 + \dots + T_n \leq t < T_1 + \dots + T_{n+1}\}}$ est une loi de Poisson de paramètre λt .

N_1 a donc même loi que la variable X que l'on cherche à simuler. D'autre part, on peut toujours mettre les variables exponentielles T_i sous la forme $-\log(U_i)/\lambda$, où les $(U_i)_{i \geq 1}$ sont des variables aléatoires suivant la loi uniforme sur $[0, 1]$ et indépendantes. N_1 s'écrit alors :

$$N_1 = \sum_{n \geq 1} n \mathbf{1}_{\{U_1 U_2 \dots U_{n+1} \leq e^{-\lambda} < U_1 U_2 \dots U_n\}}.$$

Cela donne un algorithme pour simuler une variable aléatoire de Poisson.

Méthode de rejet On veut simuler une v.a. de loi de densité f (par exemple par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d), et on suppose qu'il existe une loi de densité g facile à simuler, telle que

$$\forall x \in \mathbb{R}^d \quad f(x) \leq k g(x),$$

où k est une constante réelle. On pose $\alpha(x) = \frac{f(x)}{k g(x)}$.

Proposition 1.3.2. *Soit (X_1, U_1) un couple de v.a. indépendantes telles que X_1 suit la loi de densité g et U_1 suit la loi uniforme sur $[0, 1]$. Si $U_1 \leq \alpha(X_1)$, on pose $X = X_1$.*

Si non on rejette X_1 et on recommence en générant une suite $(X_n, U_n)_{n \geq 2}$ de v.a. indépendantes de même loi que (X_1, U_1) , jusqu'à l'instant p où $U_p \leq \alpha(X_p)$. On pose alors $X = X_p$.

La v.a. X ainsi simulée a pour densité f .

Remarque 1.3.3. 1. *La probabilité d'acceptation à l'instant 1 de la v.a. X_1 vaut*

$$\begin{aligned} p_1 &= P(U_1 \leq \alpha(X_1)) = \int \mathbf{P}(U_1 \leq \alpha(x)) P_{X_1}(dx) = \int \alpha(x) g(x) dx \\ &= \int \frac{1}{k} f(x) dx = \frac{1}{k}, \end{aligned}$$

par l'indépendance de U_1 et X_1 .

Si on ne veut pas trop de rejets lors de la simulation de X , il faut que cette probabilité d'acceptation p_1 soit la plus grande possible, et donc que k soit le plus petit possible. Comme f et g sont des densités et que $f \leq kg$, le réel k est en fait nécessairement ≥ 1 .

Remarquons de plus que les rejets seront limités si $\frac{f(x)}{kg(x)}$ est proche de 1 et donc si la fonction g a une allure similaire à celle de f .

2. L'algorithme ci-dessus est encore valable si la v.a. X à simuler a une densité f par rapport à une mesure positive μ quelconque majorée par kg où g est la densité par rapport à μ d'une variable Y facile à simuler. Ceci se traduit par

$$\mathbb{P}(X \in A) = \int_A f(x)\mu(dx) \leq \int_A kg(x)\mu(dx) = k\mathbb{P}(Y \in A).$$

Si la v.a. X a une loi portée par un ensemble discret E , on peut choisir pour μ la mesure de comptage sur E et la méthode de rejet est aussi valable pour des lois discrètes, $f(x)$ étant dans ce cas égal à $\mathbb{P}(X = x)$.

PREUVE DE LA PROPOSITION 1.3.2 Remarquons tout d'abord qu'au bout d'un nombre fini d'essais, la relation $U_p \leq \alpha(X_p)$ sera vérifiée; en effet

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\forall p \in \mathbb{N}^* X \neq X_p) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}\left(\bigcap_{p \leq N} \{X \neq X_p\}\right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}\left(\bigcap_{p \leq N} \{U_p > \alpha(X_p)\}\right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}(U_1 > \alpha(X_1))^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} (1 - p_1)^N, \end{aligned}$$

puisque les v.a. (X_p, U_p) sont indépendantes et de même loi. Par conséquent

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}[X \in A] &= \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \mathbb{P}[X = X_n, X \in A] \\
&= \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \mathbb{P}\left[\bigcap_{p \leq n-1} \{U_p > \alpha(X_p)\} \cap \{U_n \leq \alpha(X_n)\} \cap \{X_n \in A\}\right] \\
&= \sum_{n \in \mathbb{N}^*} (1 - p_1)^{n-1} \mathbb{P}[\{U_1 \leq \alpha(X_1)\} \cap \{X_1 \in A\}] \\
&= \frac{1}{p_1} \mathbb{P}[\{U_1 \leq \alpha(X_1)\} \cap \{X_1 \in A\}] \\
&= \mathbb{P}[X_1 \in A | U_1 \leq \alpha(X_1)].
\end{aligned}$$

La loi de X est donc la loi de X_1 conditionnée par l'ensemble d'acceptation $\{U_1 \leq \alpha(X_1)\}$. Elle satisfait par indépendance de X_1 et U_1 ,

$$\mathbb{P}[X \in A] = \frac{1}{p_1} \int_A \mathbb{P}(U_1 \leq \alpha(x)) P_{X_1}(dx) = k \int_A \alpha(x) g(x) dx = \int_A f(x) dx.$$

□

Pour la simulation d'autres lois que nous n'avons pas citées, ou pour d'autres méthodes de simulation des lois précédentes, on pourra consulter en particulier les ouvrages [3], [11], [5] et [42].

1.4 Méthodes de réduction de variance

Nous avons vu que la vitesse de convergence de la méthode de Monte Carlo est de l'ordre de σ/\sqrt{n} . Pour améliorer cette méthode il existe de nombreuses techniques, dites de réduction de variance, qui cherchent à diminuer la valeur de σ^2 . Nous allons passer en revue plusieurs de ces méthodes.

Echantillonnage préférentiel Supposons que l'on cherche à calculer $\mathbb{E}(g(X))$ et que la loi de X soit $f(x)dx$ (sur \mathbb{R} pour fixer les idées). On a :

$$\mathbb{E}(g(X)) = \int_{\mathbb{R}} g(x) f(x) dx.$$

Mais si \tilde{f} est la densité d'une loi telle que $\tilde{f} > 0$ et $\int \tilde{f}(x)dx = 1$, il est clair que $\mathbb{E}(g(X))$ peut aussi s'écrire :

$$\mathbb{E}(g(X)) = \int_{\mathbf{R}} \frac{g(x)f(x)}{\tilde{f}(x)} \tilde{f}(x)dx.$$

Cela signifie que $\mathbb{E}(g(X)) = \mathbb{E}\left(\frac{g(Y)f(Y)}{\tilde{f}(Y)}\right)$, où Y suit la loi $\tilde{f}(x)dx$ sous \mathbb{P} . On a donc une autre méthode de calcul de $\mathbb{E}(g(X))$, en utilisant n tirages Y_1, \dots, Y_n de Y , et en approchant $\mathbb{E}(g(X))$ par :

$$\frac{1}{n} \left(\frac{g(Y_1)f(Y_1)}{\tilde{f}(Y_1)} + \dots + \frac{g(Y_n)f(Y_n)}{\tilde{f}(Y_n)} \right).$$

Si l'on pose $Z = g(Y)f(Y)/\tilde{f}(Y)$, on aura amélioré l'algorithme si $\text{var}(Z) < \text{var}(g(X))$. Il est facile de calculer la variance de Z :

$$\text{var}(Z) = \mathbb{E}(Z^2) - \mathbb{E}(Z)^2 = \int_{\mathbf{R}} \frac{g^2(x)f^2(x)}{\tilde{f}(x)} dx - \mathbb{E}(g(X))^2.$$

Si $g(x) \geq 0$, il est facile de voir que, en choisissant $\tilde{f}(x) = g(x)f(x)/\mathbb{E}g(X)$ on annule $\text{var}(Z)$! Il ne faut pas donner trop d'importance à ce résultat, car il repose sur le fait que l'on sait calculer $\mathbb{E}(g(X))$, et c'est justement le but de la méthode.

Cela permet cependant de justifier l'heuristique suivante : prendre $\tilde{f}(x)$ aussi proche que possible de $|g(x)f(x)|$ puis la normaliser (diviser par $\int \tilde{f}(x)dx$) de façon à obtenir une densité dont la loi est facilement simulable. Évidemment, les contraintes que l'on s'impose sont largement contradictoires.

Donnons un exemple simple pour fixer les idées. Supposons que l'on cherche à calculer :

$$\int_0^1 \cos(\pi x/2) dx.$$

On peut alors remplacer le cos par un polynôme du second degré. Comme la fonction sous le signe somme est paire, vaut 0 en $x = 1$ et 1 en $x = 0$, il est naturel de prendre $\tilde{f}(x)$ de la forme $\lambda(1 - x^2)$. En normalisant on obtient, $\tilde{f}(x) = 3(1 - x^2)/2$. En calculant les variances, on peut constater que cette méthode a réduit la variance d'un facteur 100.

Variables de contrôle Dans sa version la plus simple, il s'agit d'écrire $\mathbb{E}(f(X))$ sous la forme :

$$\mathbb{E}(f(X)) = \mathbb{E}(f(X) - h(X)) + \mathbb{E}(h(X)),$$

avec $\mathbb{E}(h(X))$ qui peut se calculer explicitement et $\text{var}(f(X) - h(X))$ petit devant $\text{var}(f(X))$. On utilise alors une méthode de Monte Carlo pour $\mathbb{E}(f(X) - h(X))$ et le calcul direct pour $\mathbb{E}(h(X))$.

Commençons par un exemple simple. Supposons que l'on veuille calculer $\int_0^1 e^x dx$. Comme au voisinage de 0, $e^x \approx 1 + x$, on peut écrire :

$$\int_0^1 e^x dx = \int_0^1 (e^x - 1 - x) dx + \frac{3}{2}.$$

Il est facile de vérifier que la variance de la méthode diminue alors sensiblement.

On peut donner un exemple plus convainquant en considérant le problème du calcul du prix call (1.1). Il est facile de vérifier que les prix du put et du call vérifient :

$$C - P = \mathbb{E}(e^{\sigma g} - K) = e^{\sigma^2/2} - K.$$

L'idée est alors d'écrire $C = P + e^{\sigma^2/2} - K$ et de réaliser une méthode de Monte Carlo pour P . On a déjà vu que l'erreur est alors très sensiblement réduite.

Variables antithétiques Supposons que l'on cherche à calculer :

$$I = \int_0^1 f(x) dx.$$

Comme $x \rightarrow 1 - x$ laisse invariante la mesure dx sur $[0, 1]$, $I = \frac{1}{2} \int_0^1 (f(x) + f(1 - x)) dx$. On peut donc calculer I de la façon suivante. On tire n variables aléatoires uniformes sur $[0, 1]$ indépendantes U_1, \dots, U_n , et on approxime I par :

$$\begin{aligned} I_{2n} &= \frac{1}{n} \left(\frac{1}{2}(f(U_1) + f(1 - U_1)) + \dots + \frac{1}{2}(f(U_n) + f(1 - U_n)) \right) \\ &= \frac{1}{2n} (f(U_1) + f(1 - U_1) + \dots + f(U_n) + f(1 - U_n)). \end{aligned}$$

Lorsque l'on compare cette méthode à une méthode de Monte Carlo directe à l'issue de n tirages, on peut montrer que la qualité de l'approximation s'améliore pourvu que

$$\mathbb{E}f(U)f(1-U) < \mathbb{E}f^2(U),$$

qui est vrai dès que le v. a. $f(U)$ et $f(1-U)$ sont linéairement indépendantes.

On peut généraliser ce genre d'idée en dimension supérieure et à d'autres transformations préservant la loi de la variable aléatoire.

Par exemple, si l'on cherche à calculer le prix d'un put (1.3), on peut utiliser le fait que la loi de Z est identique à celle de $-Z$ et réduire la variance d'un coefficient proche de 2.

Méthode de stratification C'est une méthode bien connue de nos statisticiens sondeurs. Supposons que l'on cherche à calculer I :

$$I = \mathbb{E}(g(X)) = \int g(x)f(x)dx.$$

où X suit la loi $f(x)dx$. On commence par décomposer I en :

$$I = \sum_{i=1}^m I_i = \sum_{i=1}^m \mathbb{E}(\mathbf{1}_{\{X \in D_i\}}g(X))$$

où D_i est une partition de l'ensemble sur lequel on intègre. On utilise alors n_i tirages pour estimer l'intégrale I_i . Si l'on note $\sigma_i^2 = \text{var}(\mathbf{1}_{\{X \in D_i\}}g(X))$, il est facile de voir que la variance de l'approximation est donnée par :

$$\sum_{i=1}^m \frac{\sigma_i^2}{n_i}.$$

Et si on minimise cette erreur à $\sum_{i=1}^m n_i = n$ fixé, on obtient $n_i = n \frac{\sigma_i}{\sum_{i=1}^m \sigma_i}$.

Le minimum vaut alors $\frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^m \sigma_i \right)^2$. On peut montrer qu'il est inférieur à la variance que l'on obtiendrait avec n tirages aléatoires par une méthode de Monte Carlo. Evidemment on ne peut que rarement calculer les σ_i , ce qui limite la portée de cette technique (mais on peut toujours les estimer à l'aide d'une méthode de Monte Carlo!). Pour des considérations approfondies sur cette technique on pourra consulter [9].

Valeur moyenne Supposons que l'on cherche à calculer :

$$\mathbb{E}(g(X, Y)) = \int g(x, y)f(x, y)dxdy,$$

où $f(x, y)dxdy$ est la loi du couple (X, Y) .

Si l'on pose $h(x) = \frac{1}{m(x)} \int g(x, y)f(x, y)dy$, avec $m(x) = \int f(x, y)dy$, il est facile de voir que :

$$\mathbb{E}(g(X, Y)) = \mathbb{E}(h(X)).$$

En effet la loi de X est $m(x)dx$, et donc :

$$\mathbb{E}(h(X)) = \int m(x)h(x)dx = \int dx \int g(x, y)f(x, y)dy = \mathbb{E}(g(X, Y)).$$

On peut d'autre part montrer, en interprétant $h(X)$ comme une espérance conditionnelle, que :

$$\text{var}(h(X)) \leq \text{var}(g(X, Y)).$$

Ainsi, si l'on peut calculer explicitement la fonction $h(x)$, il est préférable d'utiliser une méthode de Monte Carlo pour $h(X)$.

Remarque 1.4.1. *On a dit en introduction de ce chapitre que les méthodes de Monte Carlo étaient particulièrement intéressantes pour calculer des intégrales multiples. On verra un exemple typique d'un tel calcul, dans un problème de mathématique financière, à l'exercice 9.7.5 qui clôt le dernier chapitre de ce manuel.*

1.5 Exercices

Exercice 1.5.1. *Soit X une v.a. de loi géométrique de paramètre p :*

$$\mathbb{P}(X = k) = p(1 - p)^{k-1}, k \geq 1.$$

1. *Rappeler la méthode classique de simulation à l'aide de tirages à pile ou face.*
2. *Donner une autre méthode de simulation de cette loi utilisant la fonction de répartition et comparer l'efficacité des 2 méthodes.*

Exercice 1.5.2. 1. *Rappeler les méthodes classiques de simulation d'une loi $N(0, 1)$.*

2. Proposer un algorithme de rejet permettant de simuler une variable aléatoire gaussienne à partir de la loi double exponentielle de densité $(\lambda/2) \exp(-\lambda|x|)$.
3. Soit X et Y des variables aléatoires indépendantes et de même loi exponentielle de paramètre 1.
 - (a) Trouver la loi conditionnelle de X sachant que $\{Y > (1 - X)^2/2\}$
 - (b) Soit Z une variable aléatoire suivant la loi ci dessus et S une variable aléatoire indépendante de Z prenant les valeurs ± 1 avec la probabilité $1/2$. Trouver la loi de SZ .
 - (c) En déduire une méthode de simulation d'une loi $N(0, 1)$.

Exercice 1.5.3. On dit qu'un processus $\{X(t), t \geq 0\}$, est un processus de Lévy s'il possède les deux propriétés :

- P1 :** Pour tout système $(0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n)$ les variables aléatoires $X(t_k) - X(t_{k-1})$ ($1 \leq k \leq n$) sont indépendantes (on dit alors que $X(t)$ est un processus à accroissements indépendants).
- P2 :** La loi de $X(t+h) - X(t)$ est indépendante de t (on dit alors que $X(t)$ est un processus homogène) et de plus $X(0) = 0$.

Dans le cas d'un mouvement brownien c'est à dire dans le cas d'un processus de Lévy tel que $X(t)$ suive une loi $N(0, t)$, trouver la loi de $X(t)$ sachant que $X(t-h) = x$ et $X(t+h) = y$. En déduire une simulation récursive de ce processus.

Même question pour le processus de Cauchy c'est à dire dans le cas où $X(t)$ suit une loi de Cauchy de densité $\frac{t}{\pi(x^2+t^2)}$. (on précisera la méthode de simulation de la loi conditionnelle ci dessus).

Exercice 1.5.4. Soit (X_1, X_2) un couple gaussien de coefficient de corrélation ρ et tel que pour $i = 1, 2$ la variable aléatoire X_i suive une loi $N(\mu_i, \sigma_i^2)$.

1. Montrer que si (Y_1, Y_2) est un couple de variables aléatoires indépendantes de loi $N(0, 1)$ alors le couple $Z_1 = \mu_1 + \sigma_1 Y_1$, $Z_2 = \mu_2 + \sigma_2(\rho Y_1 + \sqrt{1 - \rho^2} Y_2)$ a même loi que (X_1, X_2) . En déduire une méthode de simulation de la loi de ce couple.
2. Généraliser au cas d'une dimension quelconque.

Exercice 1.5.5. Soit X une variable aléatoire réelle de fonction de répartition F . On supposera cette fonction de répartition inversible et l'on note F^{-1} son inverse.

1. Comment simuler la loi de X conditionnellement à $X > m$ à l'aide d'une méthode de rejet ? Évaluer l'efficacité de la méthode ? Que se passe-t-il, en particulier, si m devient très grand ?
2. Si U est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$, on pose :

$$Z = F^{-1}(F(m) + (1 - F(m))U).$$

Calculer la fonction de répartition de Z et en déduire une méthode de simulation de X conditionnellement à $X > m$. Comparer l'efficacité de cette méthode à la méthode du rejet.

3. Généraliser la méthode précédente au cas où l'on cherche à simuler X conditionnellement à $a < X < b$.
4. On cherche maintenant à simuler X , de loi normale $N(\mu, \sigma^2)$, conditionnellement à $X > m$. Montrer que l'on peut se ramener au cas centré réduit, avec m arbitraire.
5. Proposer une méthode du rejet basée sur la loi exponentielle translatée de densité donnée par $\theta e^{-\theta(x-m)} \mathbf{1}_{\{x>m\}}$. Comment choisir le paramètre θ ?

Exercice 1.5.6. Echantillonnage préférentiel : On veut calculer par une méthode de Monte-Carlo :

$$p_\ell = \mathbb{P}(X \in [\ell, \ell + 1]),$$

X étant une variable aléatoire exponentielle de paramètre 1.

1. Donner l'estimateur classique de p_ℓ ainsi que sa variance.
2. Déterminer une fonction d'importance telle que les nouveaux tirages soient tous dans l'intervalle $[\ell, \ell + 1]$. Calculer la variance de ce nouvel estimateur et conclure pour les grandes valeurs de ℓ .

Exercice 1.5.7. Réduction de variance

1. Proposer une méthode d'échantillonnage préférentiel pour le calcul de

$$I = \mathbb{E}(\mathbf{1}_{\{\xi>0\}} \exp \beta \xi),$$

si ξ est une gaussienne centrée réduite et $\beta = 5$.

2. Proposer une méthode de variable de contrôle pour le même calcul.

3. Améliorer votre estimateur à l'aide d'une technique de variables antithétiques.

Exercice 1.5.8. *Le but de cet exercice est de prouver que la méthode des variables antithétiques réduit bien la variance lorsque la fonction est monotone en chacune de ses variables.*

1. On suppose que f et g sont deux fonctions croissantes bornées de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . Montrer que, si X et Y sont deux variables aléatoires réelles, on a :

$$\mathbb{E}(f(X)g(X)) + \mathbb{E}(f(Y)g(Y)) \geq \mathbb{E}(f(X)g(Y)) + \mathbb{E}(f(Y)g(X)).$$

En déduire que si X est une variable aléatoire réelle :

$$\mathbb{E}(f(X)g(X)) \geq \mathbb{E}(f(X))\mathbb{E}(g(X)) \Leftrightarrow \text{Cov}(f(X), g(X)) \geq 0$$

2. Montrez que, si X_1, \dots, X_n sont n variables aléatoires indépendantes :

$$\mathbb{E}(f(X_1, \dots, X_n)g(X_1, \dots, X_n)|X_n) = \Phi(X_n),$$

Φ étant une fonction que l'on explicitera sous forme d'une espérance. En déduire que, si f et g sont deux fonctions croissantes en chacun de leur arguments :

$$\mathbb{E}(f(X_1, \dots, X_n)g(X_1, \dots, X_n)) \geq \mathbb{E}(f(X_1, \dots, X_n))\mathbb{E}(g(X_1, \dots, X_n)).$$

3. Soit h une fonction de $[0, 1]^n$ dans \mathbb{R} monotone en chacun de ses arguments, et U_1, \dots, U_n des variables aléatoires indépendantes suivant la loi uniforme sur $[0, 1]$. Montrer que :

$$\text{Cov}(h(U_1, \dots, U_n)h(1 - U_1, \dots, 1 - U_n)) \leq 0,$$

et en déduire que la méthode des variables antithétiques réduit la variance dans ce cas.

Exercice 1.5.9. *Soit (U_1, \dots, U_n) un échantillon i.i.d. de loi uniforme sur $[0, 1]$ et $(V_1 \leq V_2 \leq \dots \leq V_n)$ l'échantillon ordonné. On convient que $V_{n+1} = 1, V_0 = 0$ et pour $i = 0, \dots, n$ on pose $\Delta_i = V_{i+1} - V_i$.*

1. Trouver la loi du couple (V_i, V_{i+1}) pour $i = 1, \dots, n - 1$ et la loi de Δ_i pour $i = 0, \dots, n$

2. Montrer que $\sup_{0 \leq i \leq n} \Delta_i$ converge presque sûrement vers 0.
3. Soit h une fonction continue nulle en 0. Montrer que l'estimateur :

$$Z_n = \sum_{i=0}^n \Delta_i h(V_i)$$

converge presque sûrement vers $I = \int_0^1 h(u) du$.

4. Montrer que :

$$\mathbb{E}(Z_n) = \int_0^1 (1 - v^n) f(v) dv$$

En déduire que Z_n est un estimateur asymptotiquement sans biais de I . Pouvaient-on prévoir ce résultat sans calcul ?

5. On suppose de plus que h est de classe C^1 . Montrer qu'il existe une constante K avec :

$$|Z_n - I| \leq K \sum_{i=0}^n \Delta_i^2$$

En déduire la vitesse de convergence de Z_n vers I dans L^1 .

Exercice 1.5.10. Programmation On reprend les formules (1.1) pour le prix d'une option d'achat (call) et (1.3) pour le prix d'une option de vente (put). On déduit de l'identité $x = x^+ - (-x)^+$ la formule de parité call-put

$$C - P = \mathbb{E}e^{\sigma Z} - K,$$

où l'espérance $\mathbb{E}e^{\sigma Z}$ se calcule explicitement, et vaut $\exp(\sigma^2/2)$, d'où une méthode de variable de contrôle, dont il est clair (pourquoi ?) qu'elle réduit la variance.

Par ailleurs, puisque Z et $-Z$ ont la même loi, on peut appliquer au calcul par Monte Carlo du call comme du put la méthode de réduction de variance par variable antithétique.

Dans l'expérimentation numérique on choisira $\sigma = 1.5$ ainsi que $K = 1$. On fera tous les calculs de Monte Carlo avec des tailles d'échantillon $N = 1\ 000$, $10\ 000$ et $100\ 000$. Pour chaque résultat, on donnera l'estimateur de Monte Carlo, et un intervalle de confiance à 95 %, basé sur le TCL et une estimation de la variance.

1. Calculer la valeur donnée par la formule de Black-Scholes (1.2).

2. *Calculer la valeur de C par Monte Carlo, en utilisant la formule (1.1), puis en utilisant la formule de parité call-put et (1.3) pour le calcul de P par Monte carlo.*
3. *Effectuer les deux mêmes calculs, en utilisant une méthode de variable antithétique.*

Chapitre 2

Chaînes de Markov

Introduction

Une chaîne de Markov est une suite aléatoire $\{X_n; n = 0, 1, 2, \dots\}$, définie sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, à valeurs dans un ensemble E qui peut être arbitraire, mais qui sera ici soit fini soit dénombrable, et qui jouit de la propriété de Markov. Sans donner tout de suite une définition formelle, indiquons qu'une suite de Markov a la propriété que connaissant X_n , on peut oublier le passé pour prédire l'avenir. Une façon de fabriquer une telle suite est de se donner une suite de v.a. $\{Y_n, n \geq 1\}$ qui sont mutuellement indépendantes, et globalement indépendantes de X_0 , à valeurs dans F , et une application $f : \mathbb{N} \times E \times F \rightarrow E$, t.q. pour $n \geq 1$,

$$X_n = f(n, X_{n-1}, Y_n).$$

D'une certaine façon, c'est le modèle le plus simple d'une suite de v. a. non indépendantes.

Les deux chapitres qui suivent donneront un aperçu des nombreuses applications des chaînes de Markov. Notons que nous allons présenter la théorie des chaînes de Markov *homogènes* (dans la formule de récurrence ci-dessus, cela revient à prendre f indépendante de n , et les Y_n de même loi), même si dans plusieurs applications on a besoin de chaînes non homogènes. Même dans ces cas-là, les propriétés asymptotiques des chaînes homogènes sont cruciales.

2.1 Définition et propriétés élémentaires.

Nous allons définir et étudier les chaînes de Markov $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans un espace (fini ou) dénombrable E . On notera x, y, \dots les points de E . Pour alléger la rédaction, on conviendra que pour chaque condition faisant intervenir une probabilité conditionnelle $\mathbb{P}(A|B)$, celle-ci n'est supposée vérifiée que dans le cas où $\mathbb{P}(B) > 0$.

Définition 2.1.1. *Le processus stochastique $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans E est appelé une chaîne de Markov si pour tout $n \in \mathbb{N}$, la loi conditionnelle de X_{n+1} sachant X_0, X_1, \dots, X_n est égale à la loi conditionnelle sachant X_n , i.e $\forall x_0, \dots, x_n, y \in E$,*

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x_n).$$

Un critère simple qui permet dans la plupart des cas de vérifier qu'un processus est une chaîne de Markov est donné par le :

Lemme 2.1.2. *Soit E et F deux ensembles dénombrables, et f une application de $\mathbb{N} \times E \times F$ dans E . Soit X_0, Y_1, Y_2, \dots des v.a. mutuellement indépendantes, X_0 à valeurs dans E et les Y_n à valeurs dans F , et $\{X_n, n \geq 1\}$ le processus à valeurs dans E défini par*

$$X_{n+1} = f(n, X_n, Y_{n+1}), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Alors $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov.

PREUVE

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n, X_{n+1} = y)}{\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)} \\ &= \sum_{\{z; f(n, x_n, z) = y\}} \frac{\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n, Y_{n+1} = z)}{\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n)} \\ &= \sum_{\{z; f(n, x_n, z) = y\}} \mathbb{P}(Y_{n+1} = z) \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_n = x_n, X_{n+1} = y)}{\mathbb{P}(X_n = x_n)} \end{aligned}$$

□

Une chaîne de Markov est l'analogie d'un système déterministe défini par une relation de récurrence du type :

$$x_{n+1} = f(n, x_n),$$

par opposition aux systèmes "avec mémoire" du type :

$$x_{n+1} = f(n, x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0).$$

Ici la fonction $f(n, \cdot)$ est remplacée par la "matrice de transition" :

$$P_{xy} = \mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x).$$

Dans toute la suite, cette matrice $P = (P_{xy}; x, y \in E)$ sera indépendante de l'instant n . On dit que la chaîne de Markov est **homogène**.

La matrice P est dite **markovienne** (ou **stochastique**), au sens où elle vérifie la propriété que $\forall x \in E$, le vecteur ligne $(P_{xy}; y \in E)$ est une mesure de probabilité sur E , c'est à dire :

$$P_{xy} \geq 0, \forall y \in E; \sum_{y \in E} P_{xy} = 1.$$

Comme on va le voir, la loi d'une chaîne de Markov est entièrement déterminée par la donnée d'une "loi initiale" $(\mu_x; x \in E)$, qui est la loi de X_0 , et de la matrice de transition de la chaîne.

Définition 2.1.3. Soit μ une probabilité sur E , et P une matrice markovienne. Un processus stochastique $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans E , et défini sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, est une chaîne de Markov (μ, P) (i.e. de loi initiale μ et de matrice de transition P) si :

- (i) $\mathbb{P}(X_0 = x) = \mu_x, \forall x \in E.$
- (ii) $\mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x) = P_{xy},$
 $\forall x_0, \dots, x_{n-1}, x, y.$

Proposition 2.1.4. Une CNS pour qu'un processus $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans E soit une chaîne de Markov (μ, P) est que $\forall n \in \mathbb{N}$, la loi du v.a. (X_0, X_1, \dots, X_n) soit donnée par

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \mu_{x_0} P_{x_0 x_1} \times \dots \times P_{x_{n-1} x_n}.$$

PREUVE

CN. Si $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}) > 0$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) &= \mathbb{P}(X_n = x_n | X_0 = x_0, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}) \\ &\quad \times \dots \times \mathbb{P}(X_1 = x_1 | X_0 = x_0) \mathbb{P}(X_0 = x_0) \end{aligned}$$

et l'égalité ci-dessus résulte de la définition. Sinon, les deux membres de l'égalité de l'énoncé sont nuls (considérer le plus petit indice k tel que $\mathbb{P}(X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k) = 0$).

CS. Le (i) de la définition résulte de l'égalité de l'énoncé. Le (ii) s'en déduit aisément. Démontrons en fait plus que (ii).

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+p} = x_{n+p} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = \frac{\mu_{x_0} P_{x_0 x_1} \times \dots \times P_{x_{n+p-1} x_{n+p}}}{\mu_{x_0} P_{x_0 x_1} \times \dots \times P_{x_{n-1} x_n}} \end{aligned}$$

(ii) s'en déduit en choisissant $p = 1$. □

On a en fait montré le :

Corollaire 2.1.5. *Si $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov (μ, P) , alors pour tous $n, p, x_0, \dots, x_{n+p}$*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_{n+p} = x_{n+p} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) \\ = P_{x_n x_{n+1}} \times \dots \times P_{x_{n+p-1} x_{n+p}}. \end{aligned}$$

Une probabilité μ sur E est considérée comme un vecteur ligne, une application $g : E \rightarrow \mathbb{R}$ est considérée comme un vecteur colonne, ce qui justifie les notations

$$(\mu P)_y = \sum_{x \in E} \mu_x P_{xy}$$

$$(Pg)_x = \sum_{y \in E} P_{xy} g_y,$$

et l'intégrale d'une fonction g par rapport à une mesure μ s'écrit (si la somme converge absolument)

$$\mu g = \sum_{x \in E} \mu_x g_x$$

Proposition 2.1.6. *Soit $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov (μ, P) . Alors*

- (i) $\mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) = \mathbb{P}(X_{n+p} = y | X_p = x) = (P^n)_{xy}$
- (ii) $\mathbb{P}(X_n = y) = (\mu P^n)_y$
- (iii) $\mathbb{E}[g(X_n) | X_0 = x] = (P^n g)_x$

PREUVE

(i)

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) &= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} \mathbb{P}(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_1 = x_1 | X_0 = x) \\
 &= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} \frac{\mu_x P_{xx_1} \times \dots \times P_{x_{n-1}y}}{\mu_x} \\
 &= \sum_{x_1, \dots, x_{n-1}} P_{xx_1} \times \dots \times P_{x_{n-1}y} \\
 &= (P^n)_{xy}
 \end{aligned}$$

(ii) On remarque que

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(X_n = y) &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(X_n = y, X_0 = x) \\
 &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x) \mu_x,
 \end{aligned}$$

et on utilise (i).

(iii) On utilise à nouveau (i) à partir de :

$$\mathbb{E}[g(X_n) | X_0 = x] = \sum_{y \in E} g_y \mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x)$$

2.2 Exemples

2.2.1 Marche aléatoire sur $E = \mathbf{Z}^d$

Soit $\{Y_n; n \in \mathbb{N}^*\}$ une suite de v.a. i.i.d. à valeurs dans \mathbf{Z}^d , de loi commune λ , et X_0 une v.a. à valeurs dans \mathbf{Z}^d indépendantes (Y_n) . Alors

$$X_{n+1} = X_n + Y_{n+1}, \in \mathbb{N}$$

est une chaîne de Markov (μ, P) , avec μ =loi de X_0 , et $P_{xy} = \lambda_{y-x}$. Le cas le plus classique des marches aléatoires dans \mathbf{Z}^d est le cas des marches aléatoires symétriques partant de 0, i.e.

$$\begin{aligned}\mu &= \delta_0 \\ \lambda_{\pm e_1} &= \frac{1}{2d},\end{aligned}$$

où (e_1, \dots, e_d) est une base orthonormée de \mathbb{R}^d .

2.2.2 Processus de Galton–Watson

C'est un processus de branchement $\{Z_n; n \in \mathbb{N}\}$ où Z_n désigne le nombre d'individus de sexe mâle de la n -ième génération portant un nom donné, ces individus étant tous issus d'un même ancêtre, l'unique mâle formant la génération 0 ($Z_0 = 1$ p.s.). On suppose que chacun des mâles de la n -ième génération engendre ξ_i^n enfants mâles ($1 \leq i \leq Z_n$) de telle sorte que

$$Z_{n+1} = \sum_{i=1}^{Z_n} \xi_i^n.$$

Notre hypothèse fondamentale est que les v.a. $\{\xi_i^n, i = 1, 2, \dots, n = 0, 1, 2, \dots\}$ sont i.i.d., de telle sorte que en particulier Z_n et $\{\xi_1^n, \dots, \xi_p^n, \dots\}$ sont indépendants.

Les $\{Z_n, n \in \mathbb{N}\}$ forment une chaîne de Markov (μ, P) , à valeurs dans \mathbb{N} , avec $\mu = \delta_1$,

$$P_{xy} = (p^{*x})_y,$$

où p^{*x} , la x -ème puissance de convolution de la loi p sur \mathbb{N} des ξ_n^k , i.e. la loi de la somme de x v.a. i.i.d. de loi commune p .

2.2.3 File d'attente en temps discret

On considère une file d'attente qui se forme à un guichet. X_n désigne le nombre de clients dans la file en attente ou en train de se faire servir à l'instant n . Entre les instants n et $n+1$ arrivent Y_{n+1} clients, et si $X_n > 0$ partent Z_{n+1} clients. On suppose que $X_0, Y_1, Z_1, Y_2, Z_2 \dots$ sont indépendantes, vérifiant $0 < \mathbb{P}(Y_n = 0) < 1$, et les Z_n vérifiant $\mathbb{P}(Z_n = 1) = p = 1 - \mathbb{P}(Z_n = 0)$. C'est à dire que

$$X_{n+1} = X_n + Y_{n+1} - \mathbf{1}_{\{X_n > 0\}} Z_{n+1}.$$

2.3 Propriété de Markov forte

Soit $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov à valeurs dans E , définie sur l'espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Etant donné μ une probabilité sur E , on utilisera la notation \mathbb{P}_μ pour désigner n'importe quelle probabilité sur (Ω, \mathcal{F}) telle que sous \mathbb{P}_μ la suite $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov de loi initiale μ , i. e. la loi de X_0 est la probabilité μ , soit

$$\mathbb{P}_\mu(X_0 = x) = \mu_x, x \in E.$$

Dans le cas $\mu = \delta_x$, on notera \mathbb{P}_x pour \mathbb{P}_{δ_x} . \mathbb{P}_x s'interprète comme la probabilité conditionnelle, sachant que $X_0 = x$. Pour tout $n \geq 0$, on notera \mathcal{F}_n la tribu des événements "déterminés par X_0, X_1, \dots, X_n ", i.e.

$$\mathcal{F}_n = \{\{\omega; (X_0(\omega), \dots, X_n(\omega)) \in B_n\}, B_n \in \mathcal{P}(E^{n+1})\}.$$

Théorème 2.3.1. *Soit $\{X_n; n \geq 0\}$ une chaîne de Markov (μ, P) . Alors pour tout $n \in \mathbb{N}$, $x \in E$ conditionnellement en $\{X_n = x\}$, $\{X_{n+p}; p \geq 0\}$ est une chaîne de Markov (δ_x, P) indépendante de (X_0, \dots, X_n) , autrement dit pour tout $A \in \mathcal{F}_n$ et pour tout $m > 0$, $x_1, \dots, x_m \in E$,*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(A \cap \{X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+m} = x_m\} | X_n = x) \\ = \mathbb{P}(A | X_n = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X = x_m) \end{aligned}$$

PREUVE

Il suffit de faire la preuve dans le cas $A = \{X_0 = y_0, X_1 = y_1, \dots, X_n = y_n\}$ (A est une réunion au plus dénombrable d'événements disjoints de cette forme, et le cas général s'en déduira donc par la σ -additivité de \mathbb{P}). Il suffit de considérer le cas $y_n = x$, car dans le cas contraire les deux membres de l'égalité sont nuls. Le membre de gauche de l'égalité de l'énoncé vaut

$$\frac{\mathbb{P}(X_0 = y_0, \dots, X_n = x, X_{n+1} = x_1, \dots, X_{n+m} = x_m)}{\mathbb{P}(X_n = x)}$$

ce qui vaut, en appliquant deux fois la Proposition 2.1.4,

$$\frac{\mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(X_n = x)} \times P_{xx_1} \times P_{x_1x_2} \times \dots \times P_{x_{m-1}x_m},$$

soit

$$\mathbb{P}(A | X_n = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m).$$

□

Le résultat précédent dit en particulier que le passé et le futur sont conditionnellement indépendants, sachant la position de la chaîne à l'instant présent n .

Nous allons maintenant étendre la propriété de Markov en remplaçant l'instant fixe n par un instant aléatoire qui vérifie une propriété particulière.

Définition 2.3.2. Une v.a. T à valeurs dans $\mathbb{N} \cup \{+\infty\}$ est appelée un **temps d'arrêt** si $\forall n \in \mathbb{N}$,

$$\{T = n\} \in \mathcal{F}_n.$$

Autrement dit, l'observation de X_0, X_1, \dots, X_n , la chaîne jusqu'à l'instant n , permet de décider si oui ou non T vaut n .

Exemple 2.3.3. *i)* $\forall i \in n$, l'instant S_i du premier passage à l'état x :

$$S_x = \begin{cases} \inf\{n \geq 0; X_n = x\} & \text{si un tel } n \text{ existe,} \\ +\infty, & \text{sinon;} \end{cases}$$

est un temps d'arrêt, ainsi que l'instant du "premier retour" à l'état x :

$$T_x = \begin{cases} \inf\{n \geq 1; X_n = x\} & \text{si un tel } n \text{ existe,} \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Remarque 2.3.4. Avec la convention que l'inf de l'ensemble vide vaut $+\infty$, il est inutile de définir ces temps sur deux lignes :

$$T_x = \inf\{n \geq 1; X_n = x\}.$$

T_x est bien un temps d'arrêt, puisque

$$\{T_x = n\} = \{X_1 \neq x\} \cap \dots \cap \{X_{n-1} \neq x\} \cap \{X_n = x\}.$$

ii) $\forall A \subset E$, le temps d'atteinte de A

$$T_A = \inf\{n \geq 1; X_n \in A\}$$

est un temps d'arrêt.

iii) Par contre, l'instant de dernier passage en A

$$L_A = \sup\{n \geq 1; X_n \in A\}$$

n'est pas un temps d'arrêt.

On notera \mathcal{F}_T la tribu des événements “déterminés par X_0, X_1, \dots, X_T ”, définie comme la tribu des événements $B \in \mathcal{F}$ tels que $\forall n \in \mathbb{N}$,

$$B \cap \{T = n\} \in \mathcal{F}_n.$$

Théorème 2.3.5. (*Propriété de Markov forte*) Soit $\{X_n : n \geq 0\}$ une chaîne de Markov (μ, P) , et T un temps d'arrêt. Conditionnellement en $\{T < \infty\} \cap \{X_T = x\}$, $\{X_{T+n}; n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov (δ_x, P) indépendante de \mathcal{F}_T . Autrement dit, pour tout $A \in \mathcal{F}_T$, et pour tout $m > 0$, $x_1, \dots, x_m \in E$,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\} | X_T = x, T < \infty) \\ &= \mathbb{P}(A | X_T = x, T < \infty) \times \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m) \end{aligned}$$

PREUVE Il suffit de montrer que $\forall n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(A \cap \{T = n\} \cap \{X_{T+1} = x_1, \dots, X_{T+m} = x_m\} | X_T = x) \\ &= \mathbb{P}(A \cap \{T = n\} | X_T = x) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m), \end{aligned}$$

ce qui résulte du Théorème 2.3.1, puis de sommer sur n .

2.4 Etats récurrents et transitoires

On définit comme ci-dessus

$$T_x = \inf\{n \geq 1; X_n = x\}, \text{ et on pose la}$$

Définition 2.4.1. L'état $x \in E$ est dit **récurrent** si $\mathbb{P}_x(T_x < \infty) = 1$, et **transitoire** dans le cas contraire (i.e. si $\mathbb{P}_x(T_x < \infty) < 1$).

On définit le nombre de retours à l'état x :

$$N_x = \sum_{n \geq 1} \mathbf{1}_{\{X_n = x\}}$$

Proposition 2.4.2. a) Si x est récurrent,

$$\mathbb{P}_x(N_x = +\infty) = 1.$$

b) Si x est transitoire,

$$\mathbb{P}_x(N_x = k) = (1 - \Pi_x) \Pi_x^k, \quad k \geq 0,$$

avec $\Pi_x = \mathbb{P}_x(T_x < \infty)$ (en particulier $N_x < \infty$, \mathbb{P}_x p.s.)

PREUVE Posons

$$\begin{aligned} T_x^2 &= \inf\{n > T_x, X_n = x\} \\ &= T_x + \inf\{n > 0, X_{T_x+n} = x\}. \end{aligned}$$

On vérifie (exercice) que T_x^2 est un temps d'arrêt.

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(T_x^2 < \infty) &= \mathbb{P}_x(T_x^2 < \infty | T_x < \infty) \mathbb{P}_x(T_x < \infty) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_x(T_x^2 = T_x + n | T_x < \infty) \mathbb{P}_x(T_x < \infty). \end{aligned}$$

Mais, en utilisant le Théorème 2.3.5 on obtient

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(T_x^2 = T_x + n | T_x < \infty) &= \mathbb{P}_x(X_{T_x+1} \neq x, \dots, X_{T_x+n-1} \neq x, X_{T_x+n} = x | T_x < \infty) \\ &= \mathbb{P}_x(X_1 \neq x, \dots, X_{n-1} \neq x, X_n = x) \\ &= \mathbb{P}_x(T_x = n) \end{aligned}$$

Finalement

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(T_x^2 < \infty) &= (\mathbb{P}_x(T_x < \infty))^2, \text{ soit} \\ \mathbb{P}_x(N_x \geq 2) &= (\mathbb{P}_x(T_x < \infty))^2, \end{aligned}$$

et on montre en itérant le même argument que

$$\mathbb{P}_x(N_x \geq k) = (\mathbb{P}_x(T_x < \infty))^k, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Les deux parties de la Proposition se déduisent aisément de cette relation.

Corollaire 2.4.3. *L'état x est récurrent ssi*

$$\sum_{n=0}^{\infty} (P^n)_{xx} = +\infty$$

PREUVE

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_x(N_x) &= \sum_{n \geq 1} \mathbb{P}_x(X_n = x) \\ &= \sum_{n \geq 1} (P^n)_{xx} \end{aligned}$$

D'après la proposition, cette quantité est infinie lorsque x est récurrent. Mais si x est transitoire,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_x(N_x) &= \sum_{k=1}^{\infty} k(1 - \Pi_x)\Pi_x^k \\ &= \prod_x (1 - \Pi_x)^{-1} < \infty\end{aligned}$$

Définition 2.4.4. On dit que l'état y est **accessible** à partir de x (noté $x \rightarrow y$) s'il existe $n \geq 0$ tel que $\mathbb{P}_x(X_n = y) > 0$. On dit que les états x et y **communiquent** (noté \leftrightarrow) si $x \rightarrow y$ et $y \rightarrow x$.

La relation $x \leftrightarrow y$ est une relation d'équivalence (exercice), et on peut donc partitionner E en classes d'équivalence modulo la relation \leftrightarrow .

Notons que $x \rightarrow y \Leftrightarrow \exists n \geq 0$ t.q. $(P^n)_{xy} > 0$, puisque $\mathbb{P}_x(X_n = y) = (P^n)_{xy}$ (Proposition 2.1.6(i)).

Théorème 2.4.5. Soit $C \subset E$ une classe d'équivalence pour la relation \leftrightarrow . Alors tous les états de C sont soit récurrents soit transitoires.

PREUVE Soit $x, y \in C$. Il suffit de montrer que x transitoire $\Rightarrow y$ transitoire (car alors par l'absurde y récurrent $\Rightarrow x$ récurrent). Comme $x \leftrightarrow y$, d'après la dernière remarque $\exists n, m > 0$ t.q. $(P^n)_{xy} > 0$ et $(P^m)_{yx} > 0$. Mais $\forall r \geq 0$,

$$(P^{n+r+m})_{xx} \geq (P^n)_{xy}(P^r)_{yy}(P^m)_{yx}$$

et

$$\sum_{r=0}^{\infty} (P^r)_{yy} \leq \frac{1}{(P^n)_{xy}(P^m)_{yx}} \sum_{n=0}^{\infty} (P^{n+r+m})_{xx} < \infty.$$

Définition 2.4.6. Une chaîne de Markov (μ, P) est dite **irréductible** si E est constitué d'une unique classe d'équivalence. Elle est dite **récurrente irréductible** si elle est irréductible et si tous les états sont récurrents.

Proposition 2.4.7. Toute chaîne de Markov irréductible sur un espace fini E est récurrente irréductible.

PREUVE Par l'absurde, puisque E est fini, il y a au moins un état qui est visité une infinité de fois avec une probabilité non nulle, donc p.s. d'après la dichotomie de la Proposition 2.4.2, et cet état (donc tous les états) est (sont) récurrent(s).

2.5 Le cas récurrent irréductible

Dans cette section, on suppose la chaîne irréductible récurrente. Nous allons commencer par étudier les **excursions** successives de la chaîne entre deux retours successifs à l'état x :

$$\mathcal{E}_k = (X_{T_x^k}, X_{T_x^{k+1}}, \dots, X_{T_x^{k+1}}), \quad k \geq 0.$$

Ces excursions sont des suites aléatoires de longueur aléatoire finie ≥ 2 , formées d'états de E distincts de x , sauf le premier et le dernier qui sont égaux à x . Notons U l'ensemble des suites

$$u = (x, x_1, \dots, x_n, x),$$

avec $n \geq 0$, $x_\ell \neq x$, $1 \leq \ell \leq n$. U est dénombrable, et constitue l'ensemble des valeurs possible des excursions $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots$. Ces v.a. prennent donc leurs valeurs dans un ensemble dénombrable, et leur loi de probabilité est caractérisée par les quantités

$$\mathbb{P}(\mathcal{E}_k = u), \quad u \in U.$$

Proposition 2.5.1. *Sous \mathbb{P}_x la suite $(\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots)$ des excursions est i.i.d., c'est à dire qu'il existe une probabilité $\{p_u, u \in U\}$ telle que pour tout $k > 0$, $u_0, \dots, u_k \in U$,*

$$\mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0, \mathcal{E}_1 = u_1, \dots, \mathcal{E}_k = u_k) = \prod_{\ell=0}^k p_{u_\ell}.$$

PREUVE C'est une conséquence de la propriété de Markov forte. En effet, $\{\mathcal{E}_0 = u_0\} \in \mathcal{F}_{T_x}$, et l'événement

$$\{\mathcal{E}_1 = u_1, \dots, \mathcal{E}_k = u_k\}$$

est de la forme

$$\{X_{T_x+1} = x_1, \dots, X_{T_x+p} = x_p\},$$

pour $p > 0$, $x_1, \dots, x_p \in E$. Donc

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0, \mathcal{E}_1 = u_1, \dots, \mathcal{E}_k = u_k) \\ &= \mathbb{P}_x(\{\mathcal{E}_0 = u_0\} \cap \{X_{T_x+1} = x_1, \dots, X_{T_x+p} = x_p\} | T_x < \infty) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0) \mathbb{P}_x(X_1 = x_1, \dots, X_p = x) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0) \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1, \dots, \mathcal{E}_{k-1} = u_k) \\ &= \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_0) \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_1) \times \dots \times \mathbb{P}_x(\mathcal{E}_0 = u_k) \\ &= p_{u_0} p_{u_1} \times \dots \times p_{u_k}, \end{aligned}$$

si $\{p_u, u \in U\}$ est la loi de \mathcal{E}_0 sous \mathbb{P}_x . \square

On appelle mesure sur E un “vecteur ligne” $\{\gamma_x; x \in E\}$ tel que $0 \leq \gamma_x < \infty, \forall x$. Dans le cas où la mesure est finie, $\sum_{x \in E} \gamma_x < \infty$, on peut la normaliser pour en faire une probabilité sur E , $\left(\frac{\gamma_x}{\sum_z \gamma_z}, x \in E\right)$. Une mesure γ est dite invariante (par la matrice de transition P) si

$$\gamma P = \gamma, \text{ i.e.}$$

$$\sum_{y \in E} \gamma_y P_{yx} = \gamma_x, x \in E.$$

Une mesure γ sera dite strictement positive si $\gamma_x > 0, \forall x \in E$.

Une mesure de probabilité γ est invariante ssi la chaîne (γ, P) a la propriété que γ est la loi de $X_n, \forall n \in \mathbb{N}$, donc $\forall n, \{X_{n+m}; m \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne (γ, P) .

Remarque 2.5.2. Soit π une probabilité invariante, c'est à dire une probabilité qui vérifie $\pi P = \pi$, ou encore $\forall x \in E$,

$$\sum_{y \neq x} \pi_y P_{yx} = \pi_x (1 - P_{xx}),$$

soit

$$\mathbb{P}(X_n \neq x, X_{n+1} = x) = \mathbb{P}(X_n = x, X_{n+1} \neq x),$$

ce qui signifie qu'à l'équilibre, le nombre moyen de départs de l'état x entre les instants n et $n + 1$ est égal au nombre moyen d'arrivées à l'état x entre n et $n + 1$. On voit que l'équation qui caractérise la probabilité invariante est très intuitive.

Théorème 2.5.3. Soit $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de matrice de transition P récurrente irréductible. Alors il existe une mesure strictement positive invariante γ , unique à une constante multiplicative près.

PREUVE **Existence** Posons $\gamma_y^x =$ nombre moyen de visites à l'état y lors de

l'excursion \mathcal{E}_0 partant de x , soit

$$\begin{aligned}
\gamma_y^x &= \mathbb{E}_x \sum_{n=1}^{T_x} \mathbf{1}_{\{X_n=y\}} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_x(X_n = y, n \leq T_x) \\
&= \sum_{z \in E} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_x(\{X_{n-1} = z, n-1 < T_x\} \cap \{X_n = y\}) \\
&= \sum_{z \in E} \left(\sum_{n=2}^{\infty} \mathbb{P}_x(X_{n-1} = z, n-1 \leq T_x) \right) P_{zy} \\
&= (\gamma^x P)_y.
\end{aligned}$$

Notons que l'on a utilisé la récurrence à l'avant dernière égalité. On va maintenant utiliser l'irréductibilité de la chaîne. $\exists n, m$ tels que $(P^n)_{xy} > 0$, $(P^m)_{yx} > 0$. Donc, puisque $\gamma_x^x = 1$,

$$\begin{aligned}
0 < (P^n)_{xy} &= \gamma_x^x (P^n)_{xy} \leq \gamma_y^x \\
0 < (P^m)_{yx} &= \gamma_x^x (P^m)_{yx} \leq (\gamma^x P^m)_y = \gamma_y^x \\
\gamma_y^x (P^m)_{yx} &\leq (\gamma^x P^m)_x = \gamma_x^x = 1.
\end{aligned}$$

Donc γ^x est bien une mesure strictement positive, qui vérifie $\gamma_x^x = 1$.

Unicité Soit λ invariante telle que $\lambda_x = 1$. On va montrer que $\lambda \geq \gamma^x$, puis que $\lambda = \gamma^x$. notons que cette partie de la preuve du théorème n'utilise que

l'irréductibilité.

$$\begin{aligned}
\lambda_y &= P_{xy} + \sum_{z_1 \neq x} \lambda_{z_1} P_{z_1 y} \\
&= P_{xy} + \sum_{z_1 \neq x} P_{xz_1} P_{z_1 y} + \sum_{z_1, z_2 \neq x} \lambda_{z_2} P_{z_2 z_1} P_{z_1 y} \\
&\geq \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{z_1, \dots, z_n \neq x} P_{xz_n} P_{z_n z_{n-1}} \times \dots \times P_{z_1 y} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_x(X_{n+1} = y, T_x \geq n+1) \\
&= \gamma_y^x.
\end{aligned}$$

Donc $\mu = \lambda - \gamma^x$ est aussi une mesure invariante, et $\mu_x = 0$. Soit $y \in E$, et n tel que $(P^n)_{yx} > 0$. Alors

$$0 = \mu_x = \sum_{z \in E} \mu_z (P^n)_{zx} \geq \mu_y (P^n)_{yx}.$$

Donc $\mu_y = 0$, et ceci $\forall y \in E$. □

On a vu qu'un état x est récurrent si

$$\mathbb{P}_x(T_x < \infty) = 1.$$

Posons $m_x = \mathbb{E}_x(T_x)$.

Si cette quantité est finie, l'état x est dit **récurrent positif**, et sinon **récurrent nul**.

Théorème 2.5.4. *On se place à nouveau dans le cas irréductible. Un état x est récurrent positif ssi tous les états sont récurrent positifs, ssi il existe une probabilité invariante, et dans ce cas elle est donnée par $\pi = (\pi_x = \frac{1}{m_x}, x \in E)$.*

PREUVE Notons que

$$m_x = \sum_{y \in E} \gamma_y^x$$

Donc si x est récurrent positif, la probabilité $\pi = (\pi_y = \frac{\gamma_y^x}{m_x}, y \in E)$ est une probabilité invariante.

Réciproquement, si π est une probabilité invariante, par l'irréductibilité (cf. la fin de la preuve de l'existence dans le Théorème 2.5.3), π est strictement positive, donc si x est un état arbitraire, $\lambda = \left(\lambda_y = \frac{\pi_y}{\pi_x}, y \in E \right)$ est une mesure invariante qui vérifie $\lambda_x = 1$. Par l'irréductibilité et la preuve de l'unicité dans le Théorème 2.5.3,

$$m_x = \sum_{y \in E} \gamma_y^x = \sum_{y \in E} \frac{\pi_y}{\pi_x} = \frac{1}{\pi_x} < \infty.$$

Donc l'état x , comme tous les états, est récurrent positif. \square

La dichotomie suivante résulte des deux théorèmes précédents : dans le cas *récurrent irréductible*, la chaîne est *récurrente positive* s'il existe une *probabilité invariante, récurrente nulle* si toute mesure invariante est de masse infinie ($\sum_i \pi_i = +\infty$). En particulier, si $|E| < \infty$, il n'existe pas d'état récurrent nul, tout état récurrent est récurrent positif.

Corollaire 2.5.5. *Soit $\{X_n\}$ une chaîne de Markov irréductible, récurrente positive. Pour tout $x \in E$, on pose $T_x = \inf\{n > 0, X_n = x\}$. Alors pour tout $y \in E$,*

$$\mathbb{E}_y(T_x) < \infty.$$

PREUVE Remarquons que

$$T_x \geq T_x \mathbf{1}_{\{T_y < T_x\}},$$

d'où en prenant l'espérance sous \mathbb{P}_x ,

$$m_x \geq \mathbb{E}_x(T_x | T_y < T_x) \mathbb{P}_x(T_y < T_x).$$

Mais il résulte de propriété de Markov forte que $\mathbb{E}_x(T_x | T_y < T_x) > \mathbb{E}_y(T_x)$, et de l'irréductibilité que $\mathbb{P}_x(T_y < T_x) > 0$. Le résultat est établi. \square

Remarque 2.5.6. Cas non irréductible. *Limitons nous pour simplifier au cas $|E| < \infty$. Il existe au moins une classe récurrente (nécessairement récurrente positive), donc il existe au moins une probabilité invariante. Toute probabilité invariante ne charge que les états récurrents. S'il y a une seule classe récurrente, alors la chaîne possède une et une seule probabilité invariante. Sinon, à chaque classe récurrente on associe une unique probabilité*

invariante dont le support est cette classe, et toutes les mesures invariantes s'obtiennent comme combinaison linéaire convexe des précédentes. Donc dès qu'il existe au moins deux classes récurrentes, il y a une infinité non dénombrable de probabilités invariantes.

Revenons au cas irréductible. On peut maintenant établir le théorème ergodique, qui constitue une généralisation de la loi des grands nombres.

Théorème 2.5.7. *Supposons la chaîne irréductible et récurrente positive. Désignons par $\pi = (\pi_x, x \in E)$ son unique probabilité invariante. Si $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ est bornée, alors \mathbb{P} p. s., quand $n \rightarrow \infty$,*

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k) \rightarrow \sum_{x \in E} \pi_x f(x).$$

PREUVE Par hypothèse, il existe c tel que $|f(x)| \leq c, \forall x \in E$.

Définissons

$$N_x(n) = \sum_{1 \leq k \leq n} \mathbf{1}_{\{X_k=x\}},$$

le nombre de retours à l'état x avant l'instant n . On veut étudier les limites quand $n \rightarrow \infty$ de

$$\frac{N_x(n)}{n}.$$

Désignons par $S_x^0, S_x^1, \dots, S_x^k, \dots$ les longueurs des excursions $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_k, \dots$ partant de x . On a

$$S_x^0 + \dots + S_x^{N_x(n)-1} \leq n < S_x^0 + \dots + S_x^{N_x(n)}.$$

Donc

$$\frac{S_x^0 + \dots + S_x^{N_x(n)-1}}{N_x(n)} \leq \frac{n}{N_x(n)} \leq \frac{S_x^0 + \dots + S_x^{N_x(n)}}{N_x(n)}$$

Mais par le caractère i.i.d. des \mathcal{E}_k (donc aussi des S_x^k),

$$\frac{S_x^0 + \dots + S_x^{N_x(n)}}{N_x(n)} \rightarrow \mathbb{E}_x(T_x) = m_x \quad \mathbb{P}_x \text{ p.s.}$$

Comme $N_x(n) \rightarrow +\infty \quad \mathbb{P}_x \text{ p.s.}$,

$$\frac{n}{N_x(n)} \rightarrow m_x \quad \mathbb{P}_x \text{ p.s.}$$

$$\frac{N_x(n)}{n} \rightarrow \frac{1}{m_x} \mathbb{P}_x \text{ p.s.}$$

Cette convergence a également lieu \mathbb{P}_μ p.s., $\forall \mu$ loi initiale, puisque les limites de $\frac{N_x(n)}{n}$ sont les mêmes pour la chaîne $\{X_n; n \geq 0\}$ et pour la chaîne $\{X_{T_x+n}; n \geq 0\}$.

Soit maintenant $F \subset E$. On note $\bar{f} = \sum_{x \in E} \pi_x f(x)$.

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k) - \bar{f} \right| &= \left| \sum_{x \in E} \left(\frac{N_x(n)}{n} - \pi_x \right) f(x) \right| \\ &\leq c \sum_{x \in F} \left| \frac{N_x(n)}{n} - \pi_x \right| + c \sum_{x \notin F} \left(\frac{N_x(n)}{n} + \pi_x \right) \\ &= c \sum_{x \in F} \left| \frac{N_x(n)}{n} - \pi_x \right| + c \sum_{x \in F} \left(\pi_x - \frac{N_x(n)}{n} \right) + 2c \sum_{x \notin F} \pi_x \\ &\leq 2c \sum_{x \in F} \left| \frac{N_x(n)}{n} - \pi_x \right| + 2c \sum_{x \notin F} \pi_x \end{aligned}$$

On choisit F fini tel que $\sum_{x \notin F} \pi_x \leq \frac{\varepsilon}{4c}$, puis $N(\omega)$ tel que $\forall n \geq N(\omega)$,

$$\sum_{x \in F} \left| \frac{N_x(n)}{n} - \pi_x \right| \leq \frac{\varepsilon}{4c},$$

et le résultat est établi dans le cas f bornée. \square

On va maintenant établir un théorème de la limite centrale, en nous limitant - pour simplifier - au cas E fini.

Théorème 2.5.8. *Soit $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov à valeurs dans E fini, de matrice de transition P irréductible. Soit π l'unique probabilité invariante de la chaîne, et $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ telle que*

$$\pi f = \sum_{x \in E} \pi_x f_x = 0.$$

Alors il existe $\sigma_f \geq 0$ tel que, quand $n \rightarrow \infty$,

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_1^n f(X_k) \text{ converge en loi vers } \sigma_f Z,$$

où $Z \simeq N(0, 1)$.

PREUVE

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_1^n f(X_k) &= \sum_{x \in E} \sqrt{n} f_x \left(\frac{N_x(n)}{n} - \pi_x \right) \\ &= \sum_{x \in E} \pi_x f_x \sqrt{\frac{N_x(n)}{n}} \left(\frac{\sqrt{N_x(n)}}{\pi_x} - \frac{n}{\sqrt{N_x(n)}} \right) \end{aligned}$$

Par le même raisonnement que dans la preuve du théorème ergodique, cette dernière quantité se comporte quand $n \rightarrow \infty$ comme

$$\sum_{x \in E} \pi_x f_x \sqrt{\frac{N_x(n)}{n}} \times \frac{\bar{S}_x^0 + \dots + \bar{S}_x^{N_x(n)}}{\sqrt{N_x(n)}},$$

avec $\bar{S}_x^k = S_x^k - \frac{1}{\pi_x}$.

Par le théorème de la limite centrale pour les v.a. i.i.d., le vecteur dont la x -ième coordonnée est

$$\frac{\bar{S}_x^0 + \dots + \bar{S}_x^{N_x(n)}}{\sqrt{N_x(n)}}$$

converge en loi quand $n \rightarrow \infty$ vers un vecteur aléatoire gaussien centré. En outre, on a les convergences p.s.

$$\frac{N_x(n)}{n} \rightarrow \pi_x, \quad x \in E.$$

On en déduit la convergence en loi de la somme ci-dessus vers une v.a. gaussienne centrée. \square

Le calcul de la variance σ_f^2 ne se déduit pas aisément de la preuve ci-dessus. On va donner - sans démonstration - une formule pour σ_f^2 . Au moins sous les hypothèses du Théorème 2.6.7 ci-dessous, la quantité suivante est bien définie :

$$(Qf)_x = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{E}_x[f(X_n)], \quad x \in E.$$

Notons que

$$(I - P)Qf = f.$$

On a

$$\begin{aligned}\sigma_f^2 &= \sum_{x \in E} \pi_x (Qf)_x^2 - \sum_x \pi_x (PQf)_x^2 \\ &= 2 \sum_x \pi_x (Qf)_x f_x - \sum_x \pi_x f_x^2.\end{aligned}$$

2.6 Le cas apériodique

On vient de montrer en particulier que dans le cas irréductible récurrent positif,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbf{1}_{\{X_k=y\}} \rightarrow \pi_y \text{ p.s. ,}$$

quand $n \rightarrow \infty$. En prenant l'espérance sous \mathbb{P}_x , on obtient que

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (P^k)_{xy} \rightarrow \pi_y, \quad \forall x, y \in E.$$

On voit que les moyennes de Césaro des $(P^k)_{xy}$ convergent. On peut se poser la question : est-ce que

$$(P^n)_{xy} \rightarrow \pi_y, \quad \forall x, y \in E \quad ?$$

Il est facile de voir que ce n'est pas toujours le cas sous l'hypothèse irréductible et récurrent positif.

Considérons une marche aléatoire sur $E = \mathbf{Z}/N$, N entier pair (i.e. on identifie 0 et N)

$$X_n = X_0 + Y_1 + \cdots + Y_n,$$

avec les Y_n i.i.d. à valeurs dans $\{-1, 1\}$, autrement dit

$$X_n = (X_0 + Y_1 + \cdots + Y_n) \bmod N.$$

Cette chaîne est irréductible, et récurrente positive car E est fini. Mais $(P^{2k+1})_{xx} = 0$, pour tout $x \in E$. Dans le cas particulier $N = 2$, on a $P^{2k} = I$ et $P^{2k+1} = P$.

Pour espérer avoir la convergence souhaitée, il faut faire une hypothèse supplémentaire

Définition 2.6.1. Un état $x \in E$ est dit **apériodique** si $\exists N$ tel que

$$(P^n)_{xx} > 0, \quad \text{pour tout } n \geq N.$$

Lemme 2.6.2. Si P est irréductible et s'il existe un état apériodique x , alors $\forall y, z \in E, \exists M$ tel que $(P^n)_{yz} > 0, \forall n \geq M$. En particulier, tous les états sont apériodiques.

PREUVE D'après l'irréductibilité $\exists r, s \in \mathbb{N}$ tels que $(P^r)_{yx} > 0, (P^s)_{xz} > 0$. En outre

$$(P^{r+n+s})_{yz} \geq (P^r)_{yx}(P^n)_{xx}(P^s)_{xz} > 0,$$

dès que $n \geq N$. Donc on a la propriété désirée avec $M = N + r + s$.

Remarque 2.6.3. Plaçons nous dans le cas irréductible, récurrent positif. Soit π la probabilité invariante. $\pi_y > 0, \forall y \in E$. Donc $(P^n)_{xy} > 0$ à partir d'un certain rang N est une CN pour que $(P^n)_{xy} \rightarrow \pi_y$. On va voir maintenant que c'est une CS.

Théorème 2.6.4. Supposons P irréductible, récurrent positif et apériodique. Soit π l'unique probabilité invariante. Alors si $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov $(\mu, P), \forall y \in E$,

$$\mathbb{P}(X_n = y) \rightarrow \pi_y, \quad n \rightarrow \infty,$$

soit

$$(\mu P^n)_y \rightarrow \pi_y,$$

pour toute loi initiale μ . En particulier, $\forall x, y \in E$,

$$(P^n)_{xy} \rightarrow \pi_y.$$

PREUVE On va utiliser un argument de couplage. Soit $\{Y_n, n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov (π, P) , indépendante de $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$, et $x \in E$ arbitraire. On pose

$$T = \inf\{n \geq 0; X_n = Y_n = x\}$$

Etape 1 Montrons que $\mathbb{P}(T < \infty) = 1$.

$\{W_n = (X_n, Y_n); n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov à valeurs dans $E \times E$, de loi initiale λ (avec $\lambda_{(x,u)} = \mu_x \pi_u$), et de matrice de transition $\tilde{P}_{(x,u)(y,v)} = P_{xy} P_{uv}$. Comme P est apériodique, $\forall x, u, y, v$, pour n assez grand

$$(\tilde{P}^n)_{(x,u)(y,v)} = (P^n)_{xy} (P^n)_{uv} > 0.$$

Donc \tilde{P} est irréductible. En outre, \tilde{P} possède la probabilité invariante

$$\tilde{\pi}_{(x,u)} = \pi_x \pi_u.$$

Donc, d'après le Théorème 2.5.4, \tilde{P} est récurrent positif. T est le premier temps de passage de la chaîne $\{W_n\}$ au point (x, x) ; il est donc fini p.s.

Etape 2 On pose

$$Z_n = \begin{cases} X_n, & n \leq T; \\ Y_n, & n > T. \end{cases}$$

On va maintenant montrer que $\{Z_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov (μ, P) .

Notons que par la propriété de Markov forte, les deux processus $\{X_{T+n}; n \geq 0\}$ et $\{Y_{T+n}; n \geq 0\}$ sont des chaînes de Markov (δ_x, P) , indépendantes de (X_0, \dots, X_T) . Par conséquent, $\{Z_n, n \in \mathbb{N}\}$ est, comme $\{X_n\}$, une chaîne de Markov (μ, P) .

Etape 3 On va conclure. On a trois identités

$$\mathbb{P}(Z_n = y) = \mathbb{P}(X_n = y)$$

$$\mathbb{P}(Y_n = y) = \pi_y$$

$$\mathbb{P}(Z_n = y) = \mathbb{P}(X_n = y, n \leq T) + \mathbb{P}(Y_n = y, n > T)$$

Donc

$$\begin{aligned} |\mathbb{P}(X_n = y) - \pi_y| &= |\mathbb{P}(Z_n = y) - \mathbb{P}(Y_n = y)| \\ &\leq \mathbb{P}(n < T) \\ &\rightarrow 0, \end{aligned}$$

quand $n \rightarrow \infty$. □

On va maintenant préciser la vitesse de convergence dans le théorème précédent, sous une hypothèse supplémentaire, dite condition de Doeblin :

$\exists n_0 \in \mathbb{N}$, $\beta > 0$ et une probabilité ν sur E tels que

$$(D) \quad (P^{n_0})_{xy} \geq \beta \nu_y, \quad \forall x, y \in E.$$

Remarque 2.6.5. *La condition (D) est équivalente à la condition*

$$\exists x \in E, n_0 \geq 1 \quad \text{tels que} \quad \inf_{y \in E} (P^{n_0})_{yx} > 0.$$

Elle entraîne que cet état x est apériodique. Mais elle n'entraîne pas l'irréductibilité (il est facile de construire un contre-exemple). On verra à l'exercice 2.9.5 que cette condition entraîne l'existence d'une unique classe récurrente, donc d'une unique probabilité invariante.

Lemme 2.6.6. *Si P est irréductible et apériodique, et E fini, alors la condition (D) est satisfaite.*

PREUVE Choisissons $x \in E$. $\forall y \in E$, $\exists n_y$ tel que $n \geq n_y \Rightarrow (P^n)_{yx} > 0$. Posons $\bar{n} = \sup_{y \in E} n_y$, $\alpha = \inf_y (P^{\bar{n}})_{yx}$. Alors $\alpha > 0$, et $\forall y \in E$,

$$(P^{\bar{n}})_{yx} \geq \alpha.$$

Donc la condition (D) est satisfaite avec $n_0 = \bar{n}$, $\beta = \alpha$, $\nu = \delta_x$. □

Par ailleurs, la condition de Doeblin est très rarement satisfaite dans le cas $\text{card}E = +\infty$, car alors typiquement $\forall n \in \mathbb{N}$, $y \in E$,

$$\inf_{x \in E} (P^n)_{xy} = 0.$$

Théorème 2.6.7. *Supposons que P est irréductible et satisfait la condition (D). Alors P est apériodique, récurrente positive, et si π désigne sa probabilité invariante,*

$$\sum_{y \in E} |(P^n)_{xy} - \pi_y| \leq 2(1 - \beta)^{[n/n_0]}, \quad \forall x \in E, n \in \mathbb{N},$$

où $[n/n_0]$ désigne la partie entière de n/n_0 .

Nous allons tout d'abord introduire un outil qui nous sera utile dans la preuve du théorème.

Définition 2.6.8. On appelle *couplage* de deux probabilités p et q sur E tout couple aléatoire (X, Y) de deux v.a. à valeurs dans E , telles que p soit la loi de X et q celle de Y .

Lemme 2.6.9. Soit p et q deux probabilités sur E . On a l'égalité

$$\|p - q\|_1 = 2 \inf_{(X, Y) \text{ couplage de } p, q} \mathbb{P}(X \neq Y).$$

PREUVE : Tout d'abord, si (X, Y) est un couplage de p et q ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X = Y) &= \sum_{x \in E} \mathbb{P}(X = Y = x) \\ &\leq \sum_{x \in E} p_x \wedge q_x, \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X \neq Y) &\geq 1 - \sum_{x \in E} p_x \wedge q_x \\ &= \sum_{x \in E} (p_x - q_x)^+, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \|p - q\|_1 &= \sum_{x \in E} |p_x - q_x| \\ &\leq 2\mathbb{P}(X \neq Y). \end{aligned}$$

D'un autre côté, posons $\alpha = \sum_{x \in E} p_x \wedge q_x$. Si ξ , U , V et W sont des v. a. indépendantes, avec $\mathbb{P}(\xi = 1) = 1 - \mathbb{P}(\xi = 0) = \alpha$, U de loi r t.q. $r_x = \alpha^{-1} p_x \wedge q_x$, V de loi \bar{p} t.q. $\bar{p}_x = (1 - \alpha)^{-1} (p_x - q_x)^+$, W de loi \bar{q} t.q. $\bar{q}_x = (1 - \alpha)^{-1} (q_x - p_x)^+$, alors

$$\begin{aligned} X &= \xi U + (1 - \xi)V, \\ Y &= \xi U + (1 - \xi)W \end{aligned}$$

réalise un couplage (X, Y) de p et q tel que $2\mathbb{P}(X \neq Y) = \|p - q\|_1$. \square

PREUVE DU THÉORÈME 2.6.7 : La chaîne étant irréductible, la condition (D) entraîne clairement son caractère apériodique.

Etape 1 On va tout d'abord montrer que pour toutes probabilités μ et ν sur E ,

$$\|\mu P^n - \nu P^n\|_1 \leq 2(1 - \beta)^{\lfloor n/n_0 \rfloor}. \quad (2.1)$$

Pour cela, d'après le Lemme 2.6.9, il suffit de construire un couplage (X_n, Y_n) des probabilités μP^n et νP^n , tel que

$$\mathbb{P}(X_n \neq Y_n) \leq (1 - \beta)^{\lfloor n/n_0 \rfloor}.$$

Supposons que $n = kn_0 + m$, avec $m < n_0$. Etant donné (X_0, Y_0) de loi $\mu \times \nu$ sur $E \times E$, pour $\ell = 0, 1, \dots, k-1$, on définit $(X_{(\ell+1)n_0}, Y_{(\ell+1)n_0})$ en fonction de $(X_{\ell n_0}, Y_{\ell n_0})$ comme suit. On se donne une suite $\{\xi_\ell, U_\ell, V_\ell, \ell \geq 0\}$ de v.a. indépendantes, les ξ_ℓ de Bernoulli t.q. $\mathbb{P}(\xi_\ell = 1) = \beta = 1 - \mathbb{P}(\xi_\ell = 0)$, les U_ℓ de loi $\bar{m} = \beta^{-1}m$ et les V_ℓ de loi uniforme sur $[0, 1]$. On note enfin

$$Q_{xy} = (1 - \beta)^{-1}((P^{n_0})_{xy} - m_y),$$

et $f : E \times [0, 1] \rightarrow E$ telle que si V suit la loi uniforme sur $[0, 1]$, $f(x, V)$ suit la loi Q_x , $x \in E$. On pose alors

$$\begin{aligned} X_{(\ell+1)n_0} &= \xi_\ell U_\ell + (1 - \xi_\ell) f(X_{\ell n_0}, V_\ell) \\ Y_{(\ell+1)n_0} &= \xi_\ell U_\ell + (1 - \xi_\ell) f(Y_{\ell n_0}, V_\ell). \end{aligned}$$

Notons que l'on a bien construit un couplage $(X_{\ell n_0}, Y_{\ell n_0})$ de $\mu P^{\ell n_0}$ et $\nu P^{\ell n_0}$, pour $\ell = 0, \dots, k$, tel que

$$\mathbb{P}(X_{\ell n_0} \neq Y_{\ell n_0}) \leq \mathbb{P}(\bigcap_{m=0}^{\ell} \xi_m = 0) = (1 - \beta)^\ell.$$

Il reste à construire un couplage (X_n, Y_n) de μP^n et νP^n , tel que $\{X_n \neq Y_n\} \subset \{X_{kn_0} \neq Y_{kn_0}\}$, ce qui est facile.

Etape 2 Montrons maintenant que pour toute probabilité μ , $\{\mu P^n, n \geq 0\}$ est une suite de Cauchy dans l'espace de Banach $\ell^1(E)$. Si $\nu = \mu P^m$, d'après (2.1),

$$\|\mu P^{n+m} - \mu P^n\|_1 = \|\nu P^n - \mu P^n\|_1 \leq 2c^{n-n_0},$$

où $c = (1 - \beta)^{1/n_0}$, d'où le résultat.

Etape 3 Il résulte de la 2ème étape que la suite de probabilités $\{\mu P^n, n \geq 0\}$ converge dans $\ell^1(E)$, vers une probabilité π sur E . Mais

$$\pi P = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu P^{n+1} = \pi,$$

donc π est invariante, et la chaîne est récurrente positive. En conséquence, d'après (2.1), pour toute probabilité μ sur E ,

$$\|\mu P^n - \pi\|_1 \leq 2(1 - \beta)^{\lfloor n/n_0 \rfloor},$$

ce qui établit la vitesse de convergence annoncée, et l'apériodicité.

2.7 Chaîne de Markov réversible

On se place dans le cas irréductible, récurrent positif. La formulation de la propriété de Markov “passé et futur sont conditionnellement indépendants sachant le présent” nous indique que si $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov, alors $\forall N, \{\hat{X}_n^N = X_{N-n}; 0 \leq n \leq N\}$ est aussi une chaîne de Markov. En général, la chaîne retournée n'est pas homogène, sauf si $\{X_n\}$ est initialisée avec sa probabilité invariante π .

Proposition 2.7.1. *Soit $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov (π, P) , avec π probabilité invariante et P irréductible. Alors la chaîne retournée $\{\hat{X}_n^N; 0 \leq n \leq N\}$ est une chaîne de Markov (π, \hat{P}) , avec*

$$\pi_y \hat{P}_{yx} = \pi_x P_{xy}, \quad \forall x, y \in E$$

PREUVE

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\hat{X}_{p+1} = x | \hat{X}_p = y) \\ &= \mathbb{P}(X_n = x | X_{n+1} = y) \\ &= \mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x) \times \frac{\mathbb{P}(X_n = x)}{\mathbb{P}(X_{n+1} = y)}. \end{aligned}$$

□

On dit que la chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est **réversible** si $\hat{P} = P$, ce qui a lieu si et seulement si la relation suivante dite d’“équilibre ponctuel” est satisfaite :

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

avec π probabilité invariante. Il est facile de vérifier que si une probabilité π satisfait cette relation, alors elle est invariante par P . La réciproque n'a aucune raison d'être vraie.

Remarque 2.7.2. Si π est la probabilité invariante d'une chaîne irréductible (et donc aussi récurrente positive), la chaîne n'est pas nécessairement réversible par rapport à π . Supposons que $\text{card}E \geq 3$. Alors il peut exister $x \neq y$ t.q. $P_{xy} = 0 \neq P_{yx}$. D'où $\pi_x P_{xy} = 0 \neq \pi_y P_{yx}$. Les transitions de y à x de la chaîne initiale correspondent aux transitions de x à y de la chaîne retournée, donc $P_{yx} \neq 0 \Rightarrow \hat{P}_{xy} \neq 0$, d'où $\hat{P} \neq P$.

Remarque 2.7.3. Étant donné une matrice de transition d'une chaîne de Markov récurrente irréductible P , un problème classique est de calculer sa probabilité invariante.

Un autre problème, qui apparaîtra au chapitre suivant, est de déterminer une matrice de transition P irréductible, dont la chaîne associée admette comme probabilité invariante une mesure π donnée.

Le second problème est facile à résoudre. En fait il existe un grand nombre de solutions. Le plus simple est de chercher P telle que la chaîne correspondante soit réversible par rapport à la mesure donnée π . Autrement dit, il suffit de trouver une matrice markovienne irréductible P telle que la quantité $\pi_x P_{xy}$ soit symétrique en x, y .

Pour résoudre le premier problème, on peut là aussi chercher à résoudre l'équation

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

qui contrairement à l'équation $\pi P = \pi$, n'impose pas de sommation en i . Mais cette équation n'a de solution que si la chaîne est réversible par rapport à son unique probabilité invariante, ce qui n'est pas forcément le cas.

Supposons maintenant que l'on se donne le couple (P, π) , et que l'on veuille vérifier si oui ou non π est la probabilité invariante associée à la chaîne de matrice de transition irréductible P . Si la quantité $\pi_x P_{xy}$ est symétrique en x, y , la réponse est oui, et on a même mieux, la réversibilité. Si non, il faut vérifier si oui ou non $\pi P = \pi$. Une façon de faire ce calcul est donnée par la Proposition suivante.

Proposition 2.7.4. Soit P une matrice de transition irréductible, et π une probabilité sur E . On pose pour tout $x, y \in E$,

$$\hat{P}_{xy} = \begin{cases} \frac{\pi_y}{\pi_x} P_{yx}, & \text{si } x \neq y, \\ P_{xx}, & \text{si } x = y. \end{cases}$$

Alors π est la probabilité invariante de la chaîne de matrice de transition P

et \hat{P} est la matrice de la chaîne retournée ssi pour tout $x \in E$,

$$\sum_{y \in E} \hat{P}_{xy} = 1.$$

2.8 Statistique des chaînes de Markov

Le but de cette section est d'introduire des notions élémentaires sur la statistique des chaînes de Markov.

On a vu que pour tout $n > 0$, la loi du vecteur aléatoire (X_0, X_1, \dots, X_n) ne dépend que de la loi initiale μ et de la matrice de transition P .

La première question que l'on peut se poser en statistique des chaînes de Markov est : peut-on estimer le couple (μ, P) au vu de l'observation de la suite (X_0, X_1, \dots, X_n) , d'une telle façon que l'erreur d'estimation soit "petite" quand n est "grand". Comme on va le voir ci-dessous, on peut estimer P . Par contre, on ne peut raisonnablement estimer la loi initiale μ que si celle-ci coïncide avec la probabilité invariante, et que l'on est dans le cas irréductible et récurrent positif, ce que nous supposons dans toute la suite de cette section.

Commençons par l'estimation de la probabilité invariante μ .

Pour tout $x \in E$,

$$\hat{\mu}_x^n = \frac{1}{n+1} \sum_{\ell=0}^n \mathbf{1}_{\{X_\ell=x\}}$$

est un estimateur consistant de μ_x , puisqu'une conséquence immédiate du théorème ergodique est que

Proposition 2.8.1. *Pour tout $x \in E$, $\hat{\mu}_x^n \rightarrow \mu_x$ p.s., quand $n \rightarrow \infty$.*

Passons maintenant à l'estimation des P_{xy} , $x, y \in E$. On choisit l'estimateur

$$\hat{P}_{xy}^n = \frac{\sum_{\ell=0}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_\ell=x, X_{\ell+1}=y\}}}{\sum_{\ell=0}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_\ell=x\}}}$$

On a la

Proposition 2.8.2. *Pour tout $x, y \in E$, $\hat{P}_{xy}^n \rightarrow P_{xy}$ p.s. quand $n \rightarrow \infty$.*

PREUVE On a bien sûr

$$\hat{P}_{xy}^n = \left(\frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_\ell=x\}} \right)^{-1} \frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_\ell=x, X_{\ell+1}=y\}}.$$

On sait que

$$\frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_\ell=x\}} \rightarrow \mu_x.$$

Pour $n \geq 0$, posons $\tilde{X}_n = (X_n, X_{n+1})$. Il n'est pas très difficile de vérifier que $\{\tilde{X}_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov irréductible et récurrente positive à valeurs dans $\tilde{E} = \{(x, y) \in E \times E, P_{xy} > 0\}$, de matrice de transition $\tilde{P}_{(x,y)(u,v)} = \delta_{yu} P_{uv}$, et de probabilité invariante $\tilde{\mu}_{(x,y)} = \mu_x P_{xy}$. Le théorème ergodique appliqué à la chaîne $\{\tilde{X}_n\}$ entraîne que

$$\frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} \mathbf{1}_{\{X_\ell=x, X_{\ell+1}=y\}} \rightarrow \mu_x P_{xy}$$

2.9 Exercices

Exercice 2.9.1. *Montrer que la chaîne $(X_n, n \in \mathbb{N})$ à trois états 0, 1, 2, de matrice de transition*

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ p & 1-p-q & q \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (p, q > 0, p+q \leq 1)$$

et d'état initial 1 ($P(X_0 = 1) = 1$) change d'état pour la première fois à un instant aléatoire $T \geq 1$ de loi géométrique. Montrer ensuite que X_T est une v.a. indépendante de T , de loi $(p/(p+q), 0, q/(p+q))$, et enfin que $X_t = X_T$ si $t \geq T$.

Exercice 2.9.2. *Soit $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov de matrice de transition*

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

Déterminer les classes d'équivalence, les états transitoires et récurrents, et les mesures invariantes.

Exercice 2.9.3. On considère une chaîne de Markov $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans l'espace fini $E = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, de matrice de transition P , dont les termes hors-diagonaux sont donnés par

$$P = \begin{pmatrix} \cdot & 2/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/4 & \cdot & 0 & 0 & 1/5 & 2/5 \\ 0 & 0 & \cdot & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/3 & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & \cdot \end{pmatrix}$$

- 1 Déterminer les termes diagonaux de la matrice de transition P .
- 2 Montrer que E est constitué de trois classes d'équivalence que l'on précisera, l'une \mathcal{T} étant transitoire, les deux autres $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2$ récurrentes.
- 3 Déterminer une probabilité invariante admettant \mathcal{R}_1 comme support, et une probabilité invariante admettant \mathcal{R}_2 comme support. En déduire toutes les probabilités invariantes.

Exercice 2.9.4. Soit P une matrice markovienne sur un ensemble fini E de cardinal d .

- a Montrer que la probabilité π est invariante ssi

$$\pi(I - P + A) = a,$$

où A est la matrice $d \times d$ dont tous les éléments sont égaux à 1, et a le vecteur de \mathbb{R}^d dont tous les éléments sont égaux à 1.

- b Montrer que P est irréductible ssi $I - P + A$ est inversible.
 c Déduire des questions précédentes une méthode de calcul de π .

Exercice 2.9.5. Soit P une matrice markovienne sur un ensemble fini ou dénombrable E , qui satisfait la condition (D) de la section 2.6.

1. On suppose d'abord la condition (D) satisfaite avec $n_0 = 1$. Montrer qu'il existe un état récurrent, qui est p. s. visité par la chaîne une infinité de fois, quelque soit le point de départ. En déduire que la chaîne possède une unique classe récurrente. (Indication : on pourra montrer

qu'il existe $x \in E$, $\beta > 0$ tels que la chaîne puisse être simulée comme suit : à chaque instant n , on va à l'état x avec la probabilité β , et on fait un autre mouvement (qui lui dépend de l'état où est la chaîne) avec probabilité $1 - \beta$.

2. Montrer que le résultat est encore vrai dans le cas général de l'hypothèse (D). (Indication : considérer la chaîne échantillonnée $\{X_{kn_0}, k = 0, 1, \dots\}$).

Exercice 2.9.6. Montrer que si x est récurrent, alors $\sum_{n \geq 0} (P^n)_{xy} = +\infty$ ssi $x \leftrightarrow y$, $= 0$ ssi $x \not\leftrightarrow y$.

Exercice 2.9.7. Marche aléatoire sur \mathbf{Z} On pose

$$X_n = X_0 + Y_1 + \dots + Y_n,$$

où les X_n prennent leurs valeurs dans \mathbf{Z} , les Y_n dans $\{-1, 1\}$, $X_0, Y_1, \dots, Y_n, \dots$ étant une suite indépendante, et pour tout n ,

$$\mathbb{P}(Y_n = 1) = p = 1 - \mathbb{P}(Y_n = -1), \quad 0 < p < 1.$$

- a** Montrer que la chaîne $\{X_n\}$ est irréductible.
b Montrer que dans le cas $p \neq 1/2$, la chaîne est transitoire (utiliser la loi des grands nombres).
c On considère le cas $p = 1/2$. Montrer que la chaîne est récurrente (on évaluera $\sum_{n \geq 1} (P^n)_{00}$ en utilisant la formule de Stirling $n! \simeq \sqrt{2\pi n} (\frac{n}{e})^n$). Montrer que la chaîne est récurrente nulle (on cherchera une mesure invariante). Préciser les valeurs de

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} X_n \text{ et } \liminf_{n \rightarrow \infty} X_n.$$

Exercice 2.9.8. Marche aléatoire sur \mathbf{Z}^d On pose

$$X_n = X_0 + Y_1 + \dots + Y_n,$$

où les X_n prennent leurs valeurs dans \mathbf{Z}^d , les Y_n étant i.i.d., globalement indépendants de X_0 , de loi donnée par

$$\mathbb{P}(Y_n = \pm e_i) = (2d)^{-1}, \quad 1 \leq i \leq d,$$

$\{e_1, \dots, e_d\}$ désignant la base canonique de \mathbf{Z}^d .

Montrer que $\{X_n\}$ est une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans \mathbf{Z}^d , récurrente nulle si $d = 1, 2$, transitoire si $d \geq 3$.

Exercice 2.9.9. On reprend la marche aléatoire à valeurs dans \mathbf{Z} dans le cas symétrique (cas $p = 1/2$), et on va établir la récurrence par un argument totalement différent de celui de l'exercice 2.9.7. On suppose pour simplifier que $X_0 = x \in \mathbf{Z}$.

Pour tous $a, b \in \mathbf{Z}$, avec $a < x < b$, on pose

$$T_{a,b} = \inf\{n \geq 0; X_n \notin]a, b[\},$$

$$T_a = \inf\{n \geq 0; X_n = a\},$$

$$T_b = \inf\{n \geq 0; X_n = b\},$$

et on remarque que

$$X_{n \wedge T_{a,b}} = x + \sum_{k=1}^n Y_k \mathbf{1}_{\{T_{a,b} > k-1\}}.$$

a Montrer que les v.a. Y_k et $\mathbf{1}_{\{T_{a,b} > k-1\}}$ sont indépendantes. En déduire que

$$\mathbb{E}X_{n \wedge T_{a,b}} = x.$$

b Montrer que $|X_{n \wedge T_{a,b}}| \leq \sup(|a|, |b|)$, $T_{a,b} < \infty$ p.s., et

$$\mathbb{E}X_{T_{a,b}} = x.$$

c Établir les identités

$$\mathbb{P}(X_{T_{a,b}} = a) = \frac{b-x}{b-a}, \quad \mathbb{P}(X_{T_{a,b}} = b) = \frac{x-a}{b-a}.$$

c Montrer que $\mathbb{P}(T_a < T_n) \rightarrow 1$, quand $n \rightarrow \infty$.

d Montrer que $T_a < \infty$ p.s., et que de même $T_b < \infty$ p.s. En déduire que la chaîne est récurrente.

Exercice 2.9.10. Marche aléatoire réfléchie en 0 Les $\{Y_n\}$ étant définis comme à l'exercice 2.9.7, on définit la chaîne de Markov $\{X_n\}$ à valeurs dans \mathbf{N} par la formule de récurrence

$$X_{n+1} = \mathbf{1}_{\{X_n > 0\}} Y_{n+1} + \mathbf{1}_{\{X_n = 0\}}.$$

On suppose bien sûr que $X_0 \in \mathbf{N}$. On notera ci-dessous $\{X'_n\}$ la marche aléatoire de l'exercice 2.9.7, avec le même X_0 et les mêmes $\{Y_n\}$ que ceux utilisés dans la définition de la chaîne $\{X_n\}$. On utilisera dans cet exercice les résultats de l'exercice 2.9.7.

- **a** Montrer que la chaîne ainsi définie est irréductible à valeurs dans \mathbb{N} . Préciser sa matrice de transition.
- **b** Montrer que p.s., $X_n \geq X'_n, \forall n$. En déduire que $\{X_n\}$ est transitoire dans le cas $p > 1/2$.
- **c** On pose $T = \inf\{n \geq 0, X_n = 0\}$. Montrer que $X_n = X'_n$ si $T \geq n$. En déduire que la chaîne est récurrente dans le cas $p \leq 1/2$ (on pourra par exemple montrer que l'état 1 est récurrent).
- **d** Montrer que la chaîne est récurrente nulle dans le cas $p = 1/2$, récurrente positive dans le cas $p < 1/2$ (on montrera que dans le premier (resp. le second) cas, la mesure $(1/2, 1, 1, 1, \dots)$ (resp. la mesure μ définie par

$$\mu_0 = \frac{1-2p}{2(1-p)}, \quad \mu_x = \frac{1-2p}{2} \frac{p^{x-1}}{(1-p)^{x+1}}, \quad x \geq 1$$

est une mesure invariante).

Exercice 2.9.11. Chaîne de naissance et de mort Soit $\{X_n\}$ une chaîne de Markov à valeurs dans $E = \mathbb{N}$, de matrice de transition P définie par

$$P_{x,x-1} = q_x, \quad P_{x,x} = r_x, \quad P_{x,x+1} = p_x,$$

avec pour tout $x \in \mathbb{N}$, $p_x + r_x + q_x = 1$, $q_0 = 0$, $q_x > 0$ si $x > 0$, et $p_x > 0$ pour tout $x \in \mathbb{N}$.

Pour $x \in \mathbb{N}$, on pose $\tau_x = \inf\{n \geq 0, X_n = x\}$. Etant donnés trois états a , x et b tels que $a \leq x \leq b$, on pose $u(x) = \mathbb{P}_x(\tau_a < \tau_b)$. On définit $\{\gamma_x, x \in \mathbb{N}\}$ par $\gamma_0 = 1$ et pour $x > 0$, $\gamma_x = q_1 \times \dots \times q_x / p_1 \times \dots \times p_x$.

1. Montrer que la chaîne est irréductible à valeurs dans \mathbb{N} .
2. Pour $a < x < b$, établir une relation entre $u(x) - u(x+1)$ et $u(x-1) - u(x)$. Calculer $u(a) - u(b)$ en fonction des γ_x , et en déduire que pour $a < x < b$,

$$u(x) = \frac{\sum_{y=x}^{y=b-1} \gamma_y}{\sum_{y=a}^{y=b-1} \gamma_y}.$$

Traiter le cas particulier où $p_x = q_x$ pour tout $x > 0$.

3. Calculer $\mathbb{P}_1(\tau_0 = \infty)$ et montrer que la chaîne est récurrente ssi $\sum_{y=0}^{\infty} \gamma_y = +\infty$.

4. Déterminer les mesures sur E invariantes par P , et en déduire que la chaîne est récurrente positive ssi

$$\sum_{x=1}^{\infty} \frac{p_0 p_1 \times \cdots \times p_{x-1}}{q_1 q_2 \times \cdots \times q_x} < \infty.$$

5. Montrer que dans le cas récurrent positif la chaîne est réversible. (Indication : on remarque tout d'abord que pour $x > 0$ la relation $\pi_x = (\pi P)_x$ s'écrit

$$\pi_x P_{x,x-1} + \pi_x P_{x,x+1} = \pi_{x-1} P_{x-1,x} + \pi_{x+1} P_{x+1,x}.$$

On considère ensuite le cas $x = 0$, puis on montre par récurrence que

$$\pi_x P_{x,x+1} = \pi_{x+1} P_{x+1,x}, \quad \forall x \geq 0).$$

Exercice 2.9.12. File d'attente On considère une file d'attente en temps discret qui se forme à un guichet, suivant le phénomène suivant : à chaque instant $n \in \mathbb{N}$, il arrive un client avec la probabilité p , ($0 < p < 1$) et pas de client avec la probabilité $1 - p$. Lorsqu'il y a au moins un client en attente, à chaque instant un client est servi et quitte le système avec la probabilité q , $0 < q < 1$, et personne ne quitte le système avec la probabilité $1 - q$ (un client qui arrive à l'instant n repart au plus tôt à l'instant $n + 1$). Tous les tirages ci-dessus sont indépendants entre eux. On note X_n le nombre de clients présents dans la file à l'instant n .

1. Montrer que $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans \mathbb{N} . Préciser sa matrice de transition P_{xy} , $x, y \in \mathbb{N}$.
2. Donner une CNS sur p et q pour que la chaîne $\{X_n\}$ possède une probabilité invariante. On supposera dans la suite que cette condition est satisfaite et on notera $\{\pi_x, x \in \mathbb{N}\}$ l'unique probabilité invariante que l'on déterminera.
3. Calculer $\mathbb{E}_\pi(X_n)$.
4. On précise maintenant que les clients sont servis dans l'ordre de leur arrivée. On désigne par T le temps de séjour d'un client quelconque. Le système étant initialisé avec sa probabilité invariante, quelle est l'espérance de T ?

Exercice 2.9.13. File d'attente On considère une file d'attente qui se forme à un guichet. X_n désigne le nombre de clients dans la file en attente ou

en train de se faire servir à l'instant n . Entre les instants n et $n+1$ arrivent Y_{n+1} clients, et si $X_n > 0$ partent Z_{n+1} clients. On suppose que $X_0, Y_1, Z_1, Y_2, Z_2, \dots$ sont indépendantes, avec les Y_n i.i.d. vérifiant $0 < \mathbb{P}(Y_n = 0) < 1$, et les Z_n vérifiant $\mathbb{P}(Z_n = 1) = p = 1 - \mathbb{P}(Z_n = 0)$.

1. Montrer que $(X_n; n \in \mathbb{N})$ est une chaîne de Markov dont on précisera la probabilité de transition.
2. On note φ la fonction génératrice des Y_n , ρ celle des Z_n , Ψ_n celle des X_n . Calculer Ψ_{n+1} en fonction de Ψ_n , φ et ρ .
3. Montrer qu'il existe une unique probabilité invariante dont on calculera la fonction génératrice ssi $\mathbb{E}(Y_1) < p$.

Exercice 2.9.14. Aloha discret Le but de cet exercice est d'étudier le protocole de communication suivant : des usagers se présentent aux instants $\{1, 2, \dots, n, \dots\}$ pour transmettre un message via un canal, qui ne peut transmettre qu'un message à la fois. Lorsque deux ou plus usagers se présentent en même temps, aucun message ne passe, chaque usager en est averti, et il tente de se représenter plus tard. On cherche une politique de retransmission "distribuée", i.e. telle que chaque usager puisse décider quand se représenter, sans connaître les intentions des autres usagers. Le protocole "Aloha discret" stipule que chaque usager dont le message a été bloqué tente sa chance à l'instant suivant avec la probabilité p . Si son tirage aléatoire lui indique de ne pas se présenter, il tente sa chance à l'instant suivant avec la probabilité p , et ainsi de suite jusqu'à ce qu'un tirage lui indique de tenter sa chance. On appelle Y_n le nombre de messages "frais" (i.e. qui se présentent pour la première fois) arrivant au canal de transmission à l'instant n . On suppose que la suite $\{Y_n\}$ est i.i.d., avec $\mathbb{P}(Y_n = i) = a_i$, $i \in \mathbb{N}$, et $\mathbb{E}(Y_n) > 0$. Soit X_n le nombre de messages retardés en attente d'être transmis à l'instant n .

1. Montrer que $\{X_n\}$ est une chaîne de Markov dont on précisera la matrice de transition.
2. Montrer que $\{X_n\}$ est irréductible, mais n'est pas récurrente positive.

Exercice 2.9.15. Programmation On reprend la file d'attente de l'exercice 2.9.12.

1. Simuler et tracer une trajectoire de $\{X_n, n \geq 0\}$ de $n = 1$ à $n = 1000$, pour $p = 1/2$ et successivement $q = 3/5, 7/13, 15/29, 1/2$.
2. Puisque $\{X_n\}$ est irréductible, récurrente positive et apériodique, $(P^n)_{yx} \rightarrow \pi_x$. Tracer au choix l'histogramme (ou la fonction de répartition) empirique de $(P^n)_y$, pour $n = 100, 500, 1000$, pour une taille

d'échantillon de 10^4 . On représentera l'histogramme (resp. la fonction de répartition) de π sur le même graphique. On traitera les cas $p = 1/2$, $q = 3/5, 7/13$.

3. Comparer graphiquement les quantités

$$n^{-1} \sum_{k=1}^n \mathbf{1}_{\{X_k=x\}}, \quad x \in \mathbb{N}$$

et l'histogramme de π , pour $n = 10^3, 10^4, 10^5$. On traitera les cas $p = 1/2$, $q = 3/5, 7/13$. Pour chaque valeur de q , on pourra choisir l'intervalle utile des valeurs de x au vu des tracés de la question précédente.

2.10 Problèmes corrigés

2.10.1 Enoncés

Problème 2.10.1. On considère une chaîne de Markov en temps discret $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans l'espace fini $E = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, de matrice de transition P , dont les termes hors-diagonaux sont donnés par

$$P = \begin{pmatrix} \cdot & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & 0 & 7/8 & 0 \\ 1/4 & 1/4 & 0 & \cdot & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 3/4 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 1/5 & 0 & 1/5 & 1/5 & \cdot \end{pmatrix}$$

1. Déterminer les termes diagonaux de la matrice de transition P .
2. Déterminer les classes d'équivalence de la chaîne.
3. Montrer que les états 4 et 6 sont transitoires, et que l'ensemble des autres états se décompose en deux classes récurrentes que l'on précisera. Dans la suite, on notera $\mathcal{T} = \{4, 6\}$, \mathcal{C} la classe récurrente contenant 1, et \mathcal{C}' l'autre classe récurrente. Pour tout $x, y \in E$, on définit $\rho_x := \mathbb{P}_x(T < \infty)$, où $T := \inf\{n \geq 0; X_n \in \mathcal{C}\}$.
4. Montrer que

$$\rho_x \begin{cases} 1, & \text{si } x \in \mathcal{C}; \\ 0, & \text{si } x \in \mathcal{C}'; \end{cases}$$

et que $0 < \rho_x < 1$, si $x \in \mathcal{T}$.

5. En utilisant la partition $\{T < \infty\} = \{T = 0\} \cup \{T = 1\} \cup \{2 \leq T < \infty\}$ et en conditionnant dans le calcul de $\mathbb{P}_x(2 \leq T < \infty)$ par la valeur de X_1 , établir la formule

$$\rho_x = \sum_{y \in E} P_{xy} \rho_y, \quad \text{si } x \in \mathcal{T}.$$

6. Calculer ρ_4 et ρ_6 .

7. En déduire (quasiment sans calcul!) les valeurs de $\mathbb{P}_4(T_{\mathcal{C}'} < \infty)$ et de $\mathbb{P}_6(T_{\mathcal{C}'} < \infty)$, où $T_{\mathcal{C}'} := \inf\{n \geq 0; X_n \in \mathcal{C}'\}$.

Problème 2.10.2. Supposons qu'une mémoire d'ordinateur contient n données $1, 2, \dots, n$. Cette mémoire reçoit des requêtes successives, qui consistent en une des données. Plus la donnée requise est proche de la tête de liste, plus l'accès à la requête est rapide. On suppose que les requêtes successives sont des v. a. i. d. Si la loi commune des requêtes était connue, on aurait intérêt à ranger les données par ordre décroissant de probabilité d'être requises. Mais cette probabilité (p_1, p_2, \dots, p_n) est inconnue (ou lentement variable). On suppose que $p_k > 0, \forall 1 \leq k \leq n$.

On va donc choisir une façon de replacer la donnée après consultation, de telle sorte qu'à long terme le rang moyen des données requises soit le plus petit possible.

On va considérer deux telles méthodes. La première consiste à replacer en tête de liste la donnée qui vient d'être requise. La seconde consiste à faire progresser celle-ci d'un rang en la remplaçant dans la mémoire. Dans chacun des deux cas, on a une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans l'ensemble E des permutations de l'ensemble $\{1, 2, \dots, n\}$. On notera Q la matrice de transition de la première chaîne et π la mesure invariante associée, P la matrice de transition de la seconde chaîne et μ la mesure invariante associée. A la chaîne de matrice Q , on associe la quantité

$$J_Q \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^n \pi(\text{position de } k) p_k,$$

où $\pi(\text{position de } k)$ est l'espérance sous la probabilité π de la position de l'élément k .

A la chaîne de matrice P , on associe la quantité

$$J_P \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^n \mu(\text{position de } k) p_k.$$

1. Montrer que la chaîne de matrice Q n'est pas réversible.
2. Montrer que toute chaîne de Markov irréductible récurrente positive et apériodique qui vérifie

(i) $P_{kl} > 0 \iff P_{lk} > 0$

(ii) Pour toute excursion $k, k_1, k_2, \dots, k_m, k$,

$$P_{kk_1} \prod_{i=2}^m P_{k_{i-1}k_i} P_{k_mk} = P_{kk_m} \prod_{i=m-1}^1 P_{k_{i+1}k_i} P_{k_1k}$$

est réversible.

3. Montrer que P vérifie (i) et (ii).
4. Montrer que la seconde procédure est préférable, au sens où $J_P < J_Q$.

Problème 2.10.3. – **A** Soit X le nombre aléatoire d'individus dans une population donnée, de fonction génératrice $\phi(u) = \mathbb{E}[u^X]$, $0 \leq u \leq 1$. Indépendamment des autres, chaque individu est sélectionné avec probabilité q ($0 < q < 1$). On note Y le nombre d'individus sélectionnés parmi la population initiale de X individus. Montrer que la fonction génératrice ψ de Y (définie par $\psi(u) = \mathbb{E}[u^Y]$) est donnée par

$$\psi(u) = \phi(1 - q + qu).$$

- **B** On considère un système de service (pourvu d'un nombre illimité de serveurs), et on note X_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) le nombre de clients présents dans le système à l'instant n . On suppose qu'à l'instant $n + 1/3$ chacun des X_n clients présents est servi et quitte le système avec probabilité $1 - p$, et reste avec probabilité p (indépendamment des autres, et de tout le reste) (on notera X'_n le nombre de clients restant), et qu'à l'instant $n + 2/3$ Y_{n+1} clients nouveaux arrivent. On suppose que les variables aléatoires X_0, Y_1, Y_2, \dots sont indépendantes entre elles et globalement indépendantes des fin de service des clients aux différents instants, et que la loi commune des Y_n est la loi de Poisson de paramètre $\theta > 0$ (i.e. $\mathbb{P}(Y = k) = e^{-\theta} \theta^k / k!$, et $\mathbb{E}[u^{Y_n}] = \exp[\theta(u - 1)]$).

1. Montrer que $\{X_n; n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans \mathbb{N} .
2. Calculer $\mathbb{E}[u^{X_{n+1}} | X_n = x]$ en fonction de u, p, θ et x .
3. On note $\phi_n(u) = \mathbb{E}[u^{X_n}]$ la fonction génératrice de X_n . Calculer ϕ_{n+1} en fonction de ϕ_n , puis montrer que

$$\phi_n(u) = \exp \left[\theta(u-1) \sum_0^{n-1} p^k \right] \phi_0(1 - p^n + p^n u).$$

4. Montrer que $\psi(u) = \lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n(u)$ existe et ne dépend pas de ϕ_0 , et que ψ est la fonction génératrice d'une loi de Poisson dont on précisera le paramètre en fonction de θ et p .
5. Montrer que la chaîne $\{X_n; n \geq 0\}$ est récurrente positive et préciser sa probabilité invariante.

Problème 2.10.4. On considère une chaîne de Markov en temps discret $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans l'espace fini $E = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, de matrice de transition P , dont les termes hors-diagonaux sont donnés par

$$P = \begin{pmatrix} \cdot & 1/4 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/4 & \cdot & 0 & 1/4 & 1/3 & 0 \\ 1/2 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & \cdot & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/4 & \cdot \end{pmatrix}.$$

1. Déterminer les termes diagonaux de la matrice de transition P .
2. Montrer que E est constitué de deux classes d'équivalence que l'on précisera, l'une \mathcal{R} étant récurrente et l'autre \mathcal{T} transitoire.
3. On pose $T := \inf\{n \geq 0; X_n \in \mathcal{R}\}$, et $h_x = \mathbb{E}_x(T)$, pour $x \in E$. Montrer que $h_x = 0$ pour $x \in \mathcal{R}$, et que $1 < h_x < \infty$ pour $x \in \mathcal{T}$.
4. Montrer que pour tout $x \in \mathcal{T}$,

$$h_x = 1 + \sum_{y \in E} P_{xy} h_y.$$

En déduire les valeurs de h_x , $x \in \mathcal{T}$.

Problème 2.10.5. Soit $X_0, A_0, D_0, A_1, D_1, \dots$ des v.a. indépendantes à valeurs dans \mathbb{N} . Les D_n suivent la loi de Bernoulli de paramètre q , i. e. $\mathbb{P}(D_n = 1) = 1 - \mathbb{P}(D_n = 0) = q$, avec $0 < q < 1$. Les A_n suivent toutes la même loi définie par $\mathbb{P}(A_n = k) = r_k$, $k \in \mathbb{N}$, avec $0 \leq r_k < 1$, $0 < r_0 < 1$ et $\sum_{k=0}^{\infty} r_k = 1$. On suppose que $p = \sum_k k r_k < \infty$.

On considère la suite de v.a. $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ définie par récurrence à partir de X_0 par

$$X_{n+1} = (X_n + A_n - D_n)^+,$$

avec la notation usuelle $x^+ = \sup(x, 0)$.

1. Montrer que $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov, préciser sa matrice de transition P , et montrer que cette chaîne est irréductible.

On suppose dorénavant que $X_0 = 0$. On note $T = \inf\{n > 0; X_n = 0\}$, et on définit $S_n = \sum_{k=0}^{n-1} (A_k - D_k)$.

2. Montrer que $X_n \geq S_n$, et que $X_{n+1} = S_{n+1}$ sur l'événement $\{T > n\}$.
3. Montrer que $S_n/n \rightarrow p - q$ p.s., quand $n \rightarrow \infty$.
4. Montrer que si $p < q$, $T < \infty$ p.s.
5. On suppose que $p > q$. Montrer que la chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ visite au plus un nombre fini de fois 0.

6. En se limitant au cas $p \neq q$, préciser dans quel cas la chaîne est récurrente, et dans quel cas elle est transitoire.

On suppose dorénavant que $\mathbb{P}(A_n = 1) = 1 - \mathbb{P}(A_n = 0) = p$, avec $0 < p < 1$ (p est encore l'espérance de A_n).

7. Préciser la matrice P dans ce cas.
8. Montrer que si $p = q$ la chaîne est récurrente nulle (on utilisera le résultat de la question **c** de l'Exercice 2.9.7 sans le redémontrer, pour montrer la récurrence, puis on cherchera une mesure invariante).
9. On suppose $p < q$. Montrer que la chaîne admet une unique probabilité invariante π sur \mathbb{N} , et que $\pi_k = (1 - a)a^k$, avec $a = p(1 - q)/q(1 - p)$ (on établira une relation de récurrence pour la suite $\Delta_k = \pi_k - \pi_{k+1}$). Montrer que la chaîne est récurrente positive.

Problème 2.10.6. Étant donné un nombre $0 < p < 1$, on considère une chaîne de Markov en temps discret $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans l'espace fini

$E = \{1, 2, 3, 4\}$, de matrice de transition P donnée par

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

1. Montrer que la chaîne $\{X_n\}$ est récurrente irréductible.
2. Calculer son unique probabilité invariante π .
3. Montrer que la chaîne est apériodique. En déduire que P^n tend, quand $n \rightarrow \infty$, vers la matrice

$$\begin{pmatrix} \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 & \pi_4 \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 & \pi_4 \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 & \pi_4 \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 & \pi_4 \end{pmatrix}.$$

4. Calculer P^2 . Montrer que cette matrice coïncide avec la limite calculée ci-dessus. Préciser la loi de X_2 , ainsi que celle de X_n , $n \geq 2$.
5. On pose $T_4 = \inf\{n \geq 1, X_n = 4\}$. Calculer $\mathbb{E}_4(T_4)$.

Problème 2.10.7. On désigne par $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ une chaîne de Markov en temps discret à valeurs dans l'espace $E = \{0, 1, 2, 3, 4\}$, dont la matrice de transition est donnée par :

$$P = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ p & 0 & \frac{1-p}{2} & 0 & \frac{1-p}{2} \\ p & \frac{1-p}{2} & 0 & \frac{1-p}{2} & 0 \\ p & 0 & \frac{1-p}{2} & 0 & \frac{1-p}{2} \\ p & \frac{1-p}{2} & 0 & \frac{1-p}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

avec $0 < p < 1$. On pose $T := \inf\{n \geq 1, X_n = 0\}$.

1. Montrer que la chaîne $\{X_n\}$ est récurrente irréductible. On notera π sa probabilité invariante.
2. Montrer que sous \mathbb{P}_0 , la loi de T est une loi géométrique que l'on précisera. Montrer que $\mathbb{E}_0(T) = \frac{p+1}{p}$.
3. On note

$$N_n = \sum_{k=1}^n \mathbf{1}_{\{X_k=0\}}, \quad M_n = \sum_{k=1}^n \mathbf{1}_{\{X_k \neq 0\}}.$$

Calculer les limites quand $n \rightarrow \infty$ de $n^{-1}N_n$ et de $n^{-1}M_n$.

4. Donner un argument intuitif à l'appui de l'égalité

$$\pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = \pi_4.$$

En déduire la probabilité π .

5. Montrer que l'on a le résultat général suivant. S'il existe une bijection τ de E sur lui-même telle que

$$P_{\tau x, \tau y} = P_{xy}, \quad \forall x, y \in E,$$

alors la probabilité invariante π possède la propriété suivante : $\pi_{\tau x} = \pi_x$, $x \in E$. En déduire une justification de l'argument intuitif de la question précédente.

2.10.2 Corrigés

Corrigé du problème 2.10.1

1. On détermine les termes diagonaux de P en écrivant que la somme des termes de chaque ligne vaut 1. On trouve successivement comme termes diagonaux, dans l'ordre : $1/2$, $2/3$, $1/8$, 0 , $1/4$, $2/5$.
2. On voit que 1 et 2 communiquent, 3 et 5 communiquent, ainsi que 4 et 6. On peut aussi aller de 4 en 1, 2 ou 5, et de 6 en 2 ou 5. Mais la réciproque n'est pas vraie. Donc il y a trois classes, qui sont $\{1, 2\}$, $\{3, 5\}$ et $\{4, 6\}$.
3. Comme on l'a dit ci-dessus, la chaîne peut quitter la classe $\{4, 6\}$, alors que quand elle est dans la classe $\{1, 2\}$ ou dans la classe $\{3, 5\}$, elle n'en sort plus. Donc si la chaîne part de 4 ou de 6, elle aboutit tôt ou tard dans l'une des deux autres classes. Les états 4 et 6 sont transitoires, et les deux classes $\{1, 2\}$ et $\{3, 5\}$ sont récurrentes, puisque quand la chaîne part de l'une de ces classes, elle y reste.
4. Si $x \in \mathcal{C}$, $X_0 \in \mathcal{C}$ sous \mathbb{P}_x , donc $T = 0$ \mathbb{P}_x p.s., et $\rho_x = 1$. Si $x \in \mathcal{C}'$, sous \mathbb{P}_x la chaîne n'atteint jamais \mathcal{C} , puisqu'elle reste dans \mathcal{C}' , et donc $T = \infty$ \mathbb{P}_x p.s., et $\rho_x = 0$. Si $x \in \mathcal{T}$, $\mathbb{P}_x(X_1 = 2) > 0$, et $\mathbb{P}_x(X_1 = 5) > 0$, d'où, puisque $\{X_1 = 2\} \subset \{T < \infty\}$ et $\{X_1 = 5\} \subset \{T = \infty\}$, $0 < \rho_x < 1$.

5. Soit $x \in \mathcal{T}$.

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_x(T < \infty) &= \mathbb{P}_x(T = 0) + \mathbb{P}_x(T = 1) + \mathbb{P}_x(2 \leq T < \infty) \\ &= 0 + \mathbb{P}_x(X_1 \in \mathcal{C}) + \sum_{z \in \mathcal{T}} \mathbb{P}_x(X_1 = z, T < \infty) \\ &= \sum_{y \in \mathcal{C}} P_{xy} + \sum_{z \in \mathcal{T}} P_{xz} \rho_z \\ &= \sum_{y \in E} P_{xy} \rho_y, \end{aligned}$$

où on a utilisé à l'avant-dernière égalité

$$\sum_{z \in \mathcal{T}} \mathbb{P}_x(X_1 = z, T < \infty) = \sum_{z \in \mathcal{T}} P_{xz} \mathbb{P}_z(T < \infty),$$

ce qui résulte de la propriété de Markov, et à la dernière égalité les valeurs de ρ_x pour $x \in \mathcal{C} \cup \mathcal{C}'$.

6. L'équation ci-dessus s'écrit

$$\begin{aligned} \rho_4 &= P_{41} + P_{42} + P_{44} \rho_4 + P_{46} \rho_6 \\ \rho_6 &= P_{61} + P_{62} + P_{64} \rho_4 + P_{66} \rho_6, \end{aligned}$$

soit

$$\rho_4 = 1/2 + \rho_6/4, \quad \rho_6 = 1/5 + \rho_4/5 + 2\rho_6/5,$$

ce qui donne $\rho_4 = 7/11$, $\rho_6 = 6/11$.

7. La chaîne aboutit p.s. dans une des deux classes récurrentes (et ne visite pas l'autre), donc pour tout $x \in E$, $\mathbb{P}_x(T < \infty) + \mathbb{P}_x(T_{\mathcal{C}'} < \infty) = 1$. Soit $\mathbb{P}_4(T_{\mathcal{C}'} < \infty) = 1 - \rho_4 = 4/11$, et $\mathbb{P}_6(T_{\mathcal{C}'} < \infty) = 1 - \rho_6 = 5/11$.

Corrigé du problème 2.10.2

1. Il suffit de remarquer que pour de nombreux couples $(k, \ell) \in E^2$, $Q_{k\ell} = 0 < Q_{\ell k}$.
2. Si une chaîne irréductible, récurrente et apériodique vérifie (ii), en sommant sur k_1, k_2, \dots, k_{m-1} et en notant $\ell = k_m$, on obtient

$$(P^m)_{k\ell} P_{\ell k} = P_{k\ell} (P^m)_{\ell k}.$$

Il reste à faire tendre $m \rightarrow \infty$ pour obtenir la relation d'équilibre ponctuel.

3. P vérifie (i). Vérifions qu'elle vérifie (ii) du théorème. Considérons une excursion. Chaque élément $i \in (1, \dots, n)$ subit f_i déplacement vers l'avant, et reste r_i fois en tête, pendant qu'aucun autre point ne bouge. Le produit des probabilités de transition le long de l'excursion parcourue dans le sens progressif vaut

$$\prod_{1 \leq i \leq n} p_i^{f_i + r_i},$$

et le produit des probabilités de transition dans le sens rétrograde prend la même valeur.

4. A toute permutation (i_1, \dots, i_n) de $(1, \dots, n)$, on associe les quantités

$$I_{k\ell} = \begin{cases} 1, & \text{si } i_\ell < i_k; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Alors

$$\text{position de } k = 1 + \sum_{\ell \neq k} I_{k\ell}.$$

Donc

$$\begin{aligned} J_Q &= \sum_{1 \leq k \leq n} p_k \pi(\text{position de } k) \\ &= \sum_{1 \leq k \leq n} p_k \left[1 + \sum_{\ell \neq k} \pi(\ell \text{ précède } k) \right] \\ &= 1 + \sum_k \sum_{\ell \neq k} p_k \pi(\ell \text{ précède } k) \\ &= 1 + \sum_{k < \ell} [p_k \pi(\ell \text{ précède } k) + p_\ell \pi(k \text{ précède } \ell)] \\ &= 1 + \sum_{k < \ell} (p_k - p_\ell) \pi(\ell \text{ précède } k) + \sum_{k < \ell} p_\ell. \end{aligned}$$

Sous π , la probabilité que ℓ précède k est la probabilité que ℓ ait été appelé plus récemment que k . Donc

$$\pi(\ell \text{ précède } k) = \frac{p_\ell}{p_\ell + p_k}.$$

Il reste à montrer que si $p_\ell > p_k$,

$$\mu(\ell \text{ précède } k) > \frac{p_\ell}{p_\ell + p_k}.$$

Nous utilisons maintenant la réversibilité de la chaîne de matrice de transition P . On a

$$p_{i_{j+1}}\mu(i_1, \dots, i_j, i_{j+1}, \dots, i_n) = p_{i_j}\mu(i_1, \dots, i_{j+1}, i_j, \dots, i_n).$$

En itérant cette formule on obtient que

$$\mu(\dots, k, i_1, \dots, i_j, \ell, \dots) = \left(\frac{p_k}{p_\ell}\right)^{j+1} \mu(\dots, \ell, i_1, \dots, i_j, k, \dots).$$

Donc si $p_\ell > p_k$,

$$\mu(\dots, k, i_1, \dots, i_j, \ell, \dots) < \frac{p_k}{p_\ell} \mu(\dots, \ell, i_1, \dots, i_j, k, \dots).$$

Posons $\alpha(k, \ell) \stackrel{\text{def}}{=} \mu(k \text{ précède } \ell)$. Sommant sur toutes les permutations vérifiant k précède ℓ , et utilisant la relation ci-dessus, on vérifie que $\alpha(k, \ell) < \frac{p_k}{p_\ell} \alpha(\ell, k)$. Puisque $\alpha(k, \ell) + \alpha(\ell, k) = 1$,

$$\alpha(\ell, k) > \frac{p_\ell}{p_\ell + p_k}.$$

Corrigé du problème 2.10.3 **A** On calcule d'abord $\mathbb{E}[u^Y | X = x]$, qui vaut la fonction génératrice de la loi binomiale $B(x, q)$, soit

$$\mathbb{E}[u^Y | X = x] = (qu + 1 - q)^x,$$

donc

$$\begin{aligned} \psi(u) &= \mathbb{E}[u^Y] \\ &= \sum_{x=0}^{\infty} \mathbb{E}[u^Y | X = x] \mathbb{P}(X = x) \\ &= \mathbb{E}[(qu + 1 - q)^X] \\ &= \phi(qu + 1 - q). \end{aligned}$$

B

1. Une façon de construire la chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est la suivante. Soit $\{Z_{n,k}; n, k \in \mathbb{N}^*\}$ des v. a. de Bernoulli i.i.d., de loi commune t.q. $\mathbb{P}(Z_{n,k} = 1) = 1 - \mathbb{P}(Z_{n,k} = 0) = p$. On définit

$$X'_n = \sum_{k=1}^{X_n} Z_{n+1,k}$$

et

$$X_{n+1} = X'_n + Y_{n+1}.$$

On voit alors aisément que l'on peut appliquer le Lemme 2.1.2 pour montrer que $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov. Remarquons cependant que la suite des Y_n du lemme est ici la suite des $(Y_n, Z_{n,\cdot})$, qui prend ses valeurs dans $\{0, 1\}^{\mathbb{N}}$, qui n'est pas dénombrable mais continu (le lemme est bien sûr encore vrai dans ce cas). Cette chaîne est irréductible, sa matrice de transition P ayant même la propriété $P_{x,y} > 0$, pour tous $x, y \in \mathbb{N}$, puisque

$$P_{x,y} > \mathbb{P}(X'_n = 0 | X_n = x) \mathbb{P}(Y_{n+1} = y) > 0.$$

2. La seconde égalité ci-dessous résulte de l'indépendance entre Y_{n+1} et le couple (X_n, X'_n) .

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [u^{X_{n+1}} | X_n = x] &= \mathbb{E} [u^{X'_n + Y_{n+1}} | X_n = x] \\ &= \mathbb{E} [u^{Y_{n+1}}] \mathbb{E} [u^{X'_n} | X_n = x] \\ &= e^{\theta(u-1)} (pu + 1 - p)^x, \end{aligned}$$

3. Il résulte du dernier calcul

$$\begin{aligned} \phi_{n+1}(u) &= \mathbb{E} [e^{\theta(u-1)} (pu + 1 - p)^{X_n}] \\ &= e^{\theta(u-1)} \phi_n(pu + 1 - p), \end{aligned}$$

dont on tire la formule de l'énoncé par récurrence.

4. Quand $n \rightarrow \infty$, $1 - p^n + p^n u \rightarrow 1$. En outre ϕ_0 est continue et $\phi_0(1) = 1$, $\sum_0^{n-1} p^k \rightarrow (1 - p)^{-1}$,

$$\phi_n(u) \rightarrow \psi(u) = \exp[\theta(1 - p)^{-1}(u - 1)],$$

qui est la fonction génératrice de la loi de Poisson de paramètre $\theta(1 - p)^{-1}$.

5. Il résulte des calculs précédents que si ψ est la fonction génératrice de la loi de X_n , alors c'est aussi celle de la loi de X_{n+1} , donc la chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ admet la loi de Poisson de paramètre $\theta(1-p)^{-1}$ comme probabilité invariante. Puisque cette chaîne est irréductible, il résulte alors du théorème 2.5.4 qu'elle est récurrente positive.

Corrigé du problème 2.10.4

1. Les termes diagonaux sont $(5/12, 1/6, 1/2, 1/6, 0, 5/12)$.
2. On vérifie aisément que $\mathcal{T} = \{1, 2, 3\}$ et $\mathcal{R} = \{4, 5, 6\}$.
3. Si $x \in \mathcal{R}$, $T = 0$ \mathbb{P}_x p.s., donc $h_x = 0$. Si $x \in \mathcal{T}$, $T \geq 1$ \mathbb{P}_x p.s., et en outre $\mathbb{P}_x(T > 1) > 0$, donc

$$\mathbb{E}_x(T) \geq \mathbb{P}_x(T = 1) + 2\mathbb{P}_x(T > 1) > 1.$$

Pour montrer que $h_x < \infty$, on modifie la matrice P , en changeant par exemple la dernière ligne en $(5/12, 0, 0, 1/3, 1/4, 0)$, ce qui rend la chaîne irréductible, sans modifier la loi de T sous \mathbb{P}_x , donc sans modifier h_x . On conclut en utilisant le Corollaire 2.5.5.

4. L'identité de l'énoncé s'obtient en écrivant que le temps mis pour atteindre \mathcal{R} , partant de x à l'instant 0, vaut 1 plus le temps mis à atteindre \mathcal{R} , partant du point X_1 , soit

$$h_x = 1 + \mathbb{E}[\mathbb{E}_{X_1}(T)].$$

Tenant compte de ce que $h_4 = h_5 = h_6 = 0$, on obtient le système linéaire

$$\begin{aligned} h_1 &= 1 + \frac{5}{12}h_1 + \frac{1}{4}h_2 + \frac{1}{3}h_3 \\ h_2 &= 1 + \frac{1}{4}h_1 + \frac{1}{6}h_2 \\ h_3 &= 1 + \frac{1}{2}h_1 + \frac{1}{2}h_3. \end{aligned}$$

On trouve la solution $h_1 = 236/21$, $h_2 = 32/7$, $h_3 = 278/21$.

Corrigé du problème 2.10.5

1. Si l'on pose $Y_{n+1} = A_n - D_n$ et $f(x, y) = (x - y)^+$, la propriété de Markov résulte du Lemme 2.1.2. On a

$$\begin{cases} P_{00} = \mathbb{P}(A_n - D_n \leq 0) = r_0 + qr_1 \\ P_{xx+k} = qr_{k+1} + (1-q)r_k, \quad k \in \mathbb{N}, \\ P_{xx-1} = qr_0, \quad i \in \mathbb{N}^* \\ P_{xx-\ell} = 0, \quad \ell \geq 2, \quad i \geq \ell \end{cases}$$

Puisque $r_0 < 1$, il existe $k > 0$ tel que $r_k > 0$. En outre $q < 1$. Donc $P_{x,x+k} > 0$ et en outre $P_{x,x-1} > 0$, donc partant de x , la chaîne peut atteindre $x + nk - \ell$ en $n + \ell$ coups, $n, \ell \in \mathbb{N}^*$. Or pour tout $x \neq y$, il existe $n, \ell \in \mathbb{N}$ tels que $y = x + nk - \ell$.

2.

$$X_{n+1} \geq X_n + A_n - D_n.$$

Donc si $X_n \geq S_n$, $X_{n+1} \geq S_{n+1}$. Or $X_0 = S_0 = 0$. L'inégalité est donc démontrée par récurrence.

si $T > n$, $X_k > 0$, $1 \leq k \leq n$, donc

$$X_{k+1} = X_k + A_k - D_k, \quad 0 \leq k < n$$

d'où $X_n = S_n > 0$,

c'est à dire $X_n \geq 1$, et puisque $A_n - D_n \geq -1$,

$$X_n + A_n - D_n \geq 0$$

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

3.

$$\begin{aligned} \frac{S_n}{n} &= \frac{1}{n} \sum_0^{n-1} A_k - \frac{1}{n} \sum_0^{n-1} D_k \\ &\rightarrow \mathbb{E} A_0 - \mathbb{E} D_0 = p - q \end{aligned}$$

p.s. quand $n \rightarrow \infty$, par la loi des grands nombres.

4. Si $p < q$, $\frac{S_n}{n} \rightarrow p - q < 0$, donc $S_n \rightarrow -\infty$. Donc $T < \infty$ p.s., puisque sur $\{T = +\infty\}$, $X_n = S_n$, $\forall n$, et $X_n \geq 0$.
5. Si $p > q$, $S_n \rightarrow +\infty$. Puisque $X_n \geq S_n$, $X_n \rightarrow \infty$ p.s., d'où le résultat.

6. Dans le cas $p > q$, on vient de voir que l'état 0 est transitoire (un état récurrent est visité une infinité de fois), donc la chaîne est transitoire. Dans le cas $p < q$, $P(T < \infty) = 1$, ce qui veut dire exactement que 0 est récurrent, donc la chaîne est récurrente.

7. On a $P =$

$$\begin{pmatrix} 1-p+qp & (1-q)p & 0 & 0 & 0 \\ q(1-p) & qp+(1-q)(1-p) & (1-q)p & 0 & 0 \\ 0 & q(1-p) & qp+(1-q)(1-p) & (1-q)p & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

8. Dans le cas $p = q$, tant qu'elle est dans \mathbb{N}^* , la chaîne se comporte comme une marche aléatoire symétrique, sauf que $\mathbb{P}(X_{n+1} = X_n) > 0$. Si on définit $T_1 = \inf\{n \geq 0, X_n \neq X_0\}$, $T_2 = \inf\{n \geq T_1; X_n \neq X_{T_1}\}, \dots$ alors $Z_n = X_{T_n}$, $n \in \mathbb{N}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition

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

Sur \mathbb{N}^* , $\{Z_n\}$ se comporte comme la marche aléatoire symétrique des exercices 2.9.7 et 2.9.9. Il est facile d'en déduire que l'état 1 est récurrent. Il en est de même pour la chaîne initiale $\{X_n\}$.

Si $\pi = (1, 1, 1, \dots)$, on vérifie aisément que $\pi P = \pi$, donc il existe une mesure invariante de masse infinie, et $\{X_n\}$ est récurrente nulle.

9. La chaîne $\{X_n\}$ étant irréductible, elle admet au plus une probabilité invariante.

On remarque que

$$\frac{q(1-p)}{p(1-q)}(1-q)p + qp + (1-p)(1-q) + q(1-p)\frac{p(1-q)}{q(1-p)} = 1,$$

donc

$$(\pi P)_x = \pi_x, \quad x \geq 1.$$

On vérifie que l'on a également $(\pi P)_0 = \pi_0$. Donc $\pi = \{(1-a)a^x, x \in \mathbb{N}\}$ est une probabilité invariante, et la chaîne est récurrente positive.

Corrigé du problème 2.10.6

1. On peut aller de 1 vers 2, de 2 vers 4, de 4 vers 3 et de 3 vers 1, donc tous les états communiquent, la chaîne est irréductible, et récurrente positive puisque l'espace d'état est fini.
2. On résout le système d'équations $\pi = \pi P$, $\sum_x \pi_x = 1$, et on trouve $\pi = (p^2, p(1-p), p(1-p), (1-p)^2)$.
3. On montre aisément que $(P^n)_{11} \geq (P_{11})^n = p^n > 0, \forall n$. Donc (cf. 2.7.1 + 2.7.2) la chaîne est apériodique. Il résulte alors du théorème 2.6.4 du cours que $(P^n)_{ij} \rightarrow \pi_j$ quand $n \rightarrow \infty$, d'où le résultat.
4. Un calcul élémentaire donne bien $P^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} P^n$. On a donc aussi $P^n = P^2$, pour tout $n \geq 2$. Mais on sait que la loi de X_n vaut μP^n , si μ est la loi de X_0 . Or pour tout $n \geq 2$, $\mu P^n = \pi$ pour toute probabilité μ , puisque tous les termes de la x -ème colonne de P^n sont identiques, égaux à π_x . Donc pour tout $n \geq 2$, la loi de X_n est la probabilité invariante π . La loi limite est ici atteinte dès le rang $n = 2$.
5. D'après le théorème 2.5.4 du cours, $\mathbb{E}_x(T_x) = 1/\pi_x$, donc $\mathbb{E}_4(T_4) = (1-p)^{-2}$.

Corrigé du problème 2.10.7

1. Les états 1, 2, 3 et 4 communiquent avec l'état 0, donc la chaîne est irréductible, donc récurrente puisque l'espace d'état est fini.
2. Posons $E' = \{1, 2, 3, 4\}$. Pour $k \geq 2$, on a

$$\begin{aligned} \{T = k\} &= \{X_1 \in E', \dots, X_{k-1} \in E', X_k = 0\}, \\ \mathbb{P}_0(T = k) &= \mathbb{P}_0(X_1 \in E', \dots, X_{k-1} \in E', X_k = 0) \\ &= (1-p)^{k-2}p, \end{aligned}$$

car sachant que $X_j \in E', X_{j+1} \in E'$ avec la probabilité $1-p$, et $X_{j+1} = 0$ avec la probabilité p , ceci indépendamment des valeurs de X_0, X_1, \dots, X_{j-1} . Donc

$$\mathbb{E}_0(T) = \sum_{k=2}^{\infty} k(1-p)^{k-2}p = \frac{p+1}{p}.$$

3. En combinant les théorèmes 2.6.4 et 2.6.3 du cours, on obtient que $N_n \rightarrow p/(p+1)$ quand $n \rightarrow \infty$. Donc, puisque $M_n + N_n = 1$, $M_n \rightarrow$

$1/(p+1)$. 4 Les états 1, 2, 3, 4 jouent des rôles symétriques dans ce problème. D'après le théorème 2.5.4, $\pi_0 = p/(1+p)$. Alors $\pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = \pi_4 = [4(1+p)]^{-1}$.

4. Posons $\pi' = \pi_{\tau}$. On a

$$\pi_x = \sum_y \pi_y P_{yx} = \sum_z \pi_{\tau z} P_{\tau z, x},$$

donc si $x = \tau u$,

$$\pi'_u = \sum_z \pi'_z P_{\tau z, \tau u} = \sum_z \pi'_z P_{zu}.$$

Donc π' est invariante, et par unicité de la probabilité invariante, $\pi' = \pi$.

Revenons à notre problème. Pour toute permutation τ des points 1, 2, 3, 4, $P_{\tau x, \tau y} = P_{xy}$. D'où l'égalité $\pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = \pi_4$.

Chapitre 3

Quelques algorithmes stochastiques

Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter des algorithmes qui sont basés sur la simulation d'une chaîne de Markov.

Les trois premières sections seront consacrées à l'étude de la "méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov", très utilisée pour simuler suivant une loi de probabilité sur un ensemble de cardinal trop grand pour permettre l'utilisation de la méthode de Monte Carlo standard. La section suivante est consacrée à la présentation d'un algorithme d'optimisation : le recuit simulé.

Dans ce chapitre, toutes les chaînes de Markov prendront leurs valeurs dans un ensemble fini E .

3.1 Monte Carlo par chaîne de Markov

On a vu au chapitre 1 qu'une façon de calculer une somme du type

$$\sum_{x \in E} f(x)\pi_x,$$

où $\{\pi_x; x \in E\}$ est une probabilité, est de l'approcher par

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(U_n),$$

où (U_1, U_2, \dots) est une suite i.d.d. de v.a. de loi commune π , et la convergence de l'algorithme est assurée par la loi forte des grands nombres. Dans un certain nombre d'applications importantes en pratique, il est très difficile (pour ne pas dire impossible) de simuler des v.a. suivant la loi π , bien que E soit de cardinal fini (mais gigantesque!). Un cas typique est celui où l'on connaît les π_x à une constante multiplicative près, et où le calcul pourtant très simple de la constante de normalisation est infaisable parce que $\text{card}(E)$ est trop grand (il supposerait de sommer un nombre gigantesque de termes). Il peut être beaucoup plus commode de trouver une matrice markovienne irréductible P , qui admette π comme mesure invariante, et telle que simuler une chaîne de Markov de matrice de transition P soit très facile. C'est ce que Metropolis et al. [30] ont été les premiers à proposer dès 1953. Comment trouve-t-on une matrice P qui admet π comme probabilité invariante? En trouvant une matrice P telle que le couple (π, P) satisfasse la "relation d'équilibre ponctuel". Remarquons que pour cela la connaissance de π à une constante multiplicative près suffit. Il reste à simuler une chaîne de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ de matrice de transition P , et à faire appel au théorème ergodique pour justifier l'approximation de

$$\sum_{x \in E} f(x) \pi_x \quad \text{par} \quad \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n).$$

Etant donné une probabilité π sur E telle que $\pi_x > 0, \forall x \in E$, comment trouve-t-on une matrice markovienne P , telle que le couple (π, P) satisfasse la relation d'équilibre ponctuel? Soit R est une matrice markovienne quelconque sur E , alors la formule (avec la notation $a \wedge b = \inf(a, b)$)

$$\begin{cases} P_{xy} = R_{xy} \wedge \left(\frac{\pi_y}{\pi_x} R_{yx} \right), & x \neq y; \\ P_{xx} = 1 - \sum_{y \neq x} P_{xy} \end{cases} \quad (3.1)$$

définit bien une matrice markovienne P telle que $\pi_x P_{xy} = \pi_y P_{yx}, \forall x, y \in E$. L'irréductibilité de R ne suffit pas à assurer celle de P . Pour que P soit irréductible, il faut que pour tout $x \neq y$, il existe $n \geq 1$ et $\{x_0, \dots, x_n\} \subset E$ avec $x_0 = x$ et $x_n = y$ t. q.

$$R_{x_{k-1}x_k} \wedge R_{x_k x_{k-1}} > 0, \quad \forall 1 \leq k \leq n.$$

Comment choisit-on R en pratique ? On se donne tout d'abord un graphe G sur E non orienté, tel que pour tout $x, y \in E$, il existe $n \in \mathbb{N}$, x_1, \dots, x_{n+1} tels que $x_1 = x$, $x_{n+1} = y$ et pour tout $1 \leq k \leq n$, $(x_k, x_{k+1}) \in G$, et on choisit R telle que

$$R_{xy} > 0 \Leftrightarrow (x, y) \in G.$$

La matrice P définie par (3.1) est alors bien irréductible.

Il y a deux choix "classiques" pour R , une fois le graphe G fixé. Le premier choix, qui porte le nom d'*échantillonneur de Gibbs*, consiste à poser

$$R_{xy} = \begin{cases} \left(\sum_{\{z; (x,z) \in G\}} \pi_z \right)^{-1} \pi_y, & \text{si } (x, y) \in G; \\ 0, & \text{si } (x, y) \notin G. \end{cases}$$

Le second choix, appelé *algorithme de Metropolis*, consiste à poser

$$R_{xy} = \begin{cases} (n_x)^{-1}, & \text{si } (x, y) \in G; \\ 0, & \text{si } (x, y) \notin G; \end{cases}$$

où $n_x = |\{z; (x, z) \in G\}|$.

Remarquons que la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov est conçue pour les cas où le cardinal de E est très grand. On choisira G tel que les nombres n_x soient nettement moins grands que le cardinal de E . Alors la simulation des transitions d'une chaîne de matrice de transition R est aisée, dans les deux cas Gibbs et Metropolis. Il reste à combiner cette simulation avec l'algorithme d'Hastings, pour réaliser une transition suivant la matrice P , pour passer de X_n à X_{n+1} . Cet algorithme met en oeuvre la formule (3.1). Sachant que $X_n = x$, on génère Y_n suivant la loi $R_{x \cdot}$, et si $Y_n = y$, on fait un nouveau tirage aléatoire (indépendant de ce qui précède) qui aboutit à choisir

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_n & \text{avec probabilité } \frac{\pi_y R_{yx}}{\pi_x R_{xy}} \wedge 1, \\ X_n & \text{avec probabilité } 1 - \frac{\pi_y R_{yx}}{\pi_x R_{xy}} \wedge 1. \end{cases}$$

Autrement dit, on génère une v. a. U_n de loi uniforme sur $[0, 1]$, indépendante de toutes les autres v. a., et on pose

$$X_{n+1} = \mathbf{1}_{\{U_n \leq \pi_y R_{yx} / \pi_x R_{xy}\}} Y_n + \mathbf{1}_{\{U_n > \pi_y R_{yx} / \pi_x R_{xy}\}} X_n.$$

3.1.1 Un cadre d'application

Nous allons maintenant décrire le cadre classique d'application de la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov en physique statistique et en traitement d'images. Cette méthode est également très utilisée en statistique bayésienne, cf. la section 7.8.3 ci-dessous.

On prend E de la forme :

$$E = S^\Lambda,$$

i.e. un point $x \in E$ est une application :

$$m \in \Lambda \rightarrow x(m) \in S.$$

Λ est l'ensemble des "sites" (ensemble des points (ou "pixels") de l'image discrétisée). Λ et S sont finis, et donc aussi E .

Typiquement, Λ est très grand. Par contre, S (ensemble des niveaux de gris dans le cas d'une image) est de taille plus modeste. Dans certaines applications, $S = \{-1, +1\}$. Même dans ce cas le plus simple, $\text{card } E = 2^{\text{card } \Lambda}$, donc effectivement E est gigantesque dès que Λ est grand.

Chaque v.a. X_n de la chaîne prend ses valeurs dans S^Λ . C'est donc une application de Λ dans S . Pour chaque $m \in \Lambda$, $X_n(m)$ est une v.a. à valeurs dans S .

La chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ évolue de telle sorte qu'entre les instants n et $n + 1$ une seule composante de X est modifiée, i.e. il existe $m \in \Lambda$ tel que

$$X_{n+1} \stackrel{m}{\sim} X_n,$$

au sens où $X_{n+1}(m') = X_n(m')$, $\forall m' \neq m$. Autrement dit le graphe G ci-dessus est tel que $(x, y) \in G$ si et seulement si x et y ne diffèrent qu'en un seul site. La méthode de simulation de la chaîne de Markov va consister à choisir à chaque étape un site m à modifier, et à modifier de façon aléatoire la valeur de $X_n(m)$.

Décrivons d'abord la façon de passer de $X_n(m)$ à $X_{n+1}(m)$. On verra ensuite comment choisir la façon de "visiter" les différents sites, i.e. quel m choisir à l'instant n . La façon de passer de $X_n(m)$ à $X_{n+1}(m)$ est décrite par une matrice markovienne $P^{(m)}$, qui a la propriété que $P_{xy}^{(m)} = 0$, sauf si $x \stackrel{m}{\sim} y$ (i.e. si toutes les composantes de x et y coïncident, sauf peut être celle notée m). On veut que la mesure π soit invariante par $P^{(m)}$.

Pour cela, on va chercher à assurer la réversibilité, i.e. que

$$\pi_x P_{xy}^{(m)} = \pi_y P_{yx}^{(m)}, \quad \forall x, y \in E, m \in \Lambda.$$

On va choisir $P^{(m)}$ comme ci-dessus. Étant donnée une matrice markovienne $R^{(m)}$ telle que

$$R_{xy}^{(m)} \neq 0 \Rightarrow x \stackrel{m}{\sim} y,$$

on peut choisir pour $x \neq y$

$$\pi_x P_{xy}^{(m)} = (\pi_x R_{xy}^{(m)}) \wedge (\pi_y R_{yx}^{(m)}),$$

et

$$P_{xx}^{(m)} = 1 - \sum_{y \neq x} P_{xy}^{(m)} \geq 0.$$

Autrement dit (algorithme d'Hastings), sachant que $X_n = x$, on génère Y_n suivant la loi $R_x^{(m)}$, et si $Y_n = y$, on fait un nouveau tirage aléatoire (indépendant de ce qui précède) qui aboutit à choisir

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_n & \text{avec probabilité } \frac{\pi_y R_{yx}^{(m)}}{\pi_x R_{xy}^{(m)}} \wedge 1, \\ X_n & \text{avec probabilité } 1 - \frac{\pi_y R_{yx}^{(m)}}{\pi_x R_{xy}^{(m)}} \wedge 1. \end{cases}$$

A nouveau les deux choix "classiques" pour $R^{(m)}$ sont l'échantillonneur de Gibbs qui s'obtient en choisissant

$$P_{xy}^{(m)} = R_{xy}^{(m)} = \left(\sum_{z \stackrel{m}{\sim} x} \pi_z \right)^{-1} \pi_y, \text{ si } x \stackrel{m}{\sim} y,$$

(il consiste à choisir $X_{n+1}(m)$ en tirant suivant la loi conditionnelle sous π , sachant les autres composantes (autres que m)), et l'algorithme de Métropolis, qui sous sa forme la plus simple consiste à choisir

$$R_{xy}^{(m)} = (|S| - 1)^{-1}, \text{ si } x \stackrel{m}{\sim} y, \text{ si bien que}$$

$$P_{xy}^{(m)} = (|S| - 1)^{-1} \left(\frac{\pi_y}{\pi_x} \wedge 1 \right), \text{ } x \stackrel{m}{\sim} y, x \neq y.$$

Cela revient à choisir d'abord une nouvelle valeur y_m au site m , uniformément sur $S \setminus \{X_n(m)\}$, puis à choisir $X_{n+1}(m) = y_m$ si $\pi_y \geq \pi_x$, et avec probabilité $\frac{\pi_y}{\pi_x}$ si cette quantité est inférieure à 1.

Il reste à décrire le "programme de visite des sites", i.e. décider pour chaque n quelle composante m de X_n on veut modifier. Une méthode consiste à visiter Λ dans un ordre fixé, puis de recommencer. L'autre, que nous adopterons

pour sa simplicité de formulation mathématique, consiste à effectuer à chaque instant n un tirage de m suivant la loi uniforme sur Λ , indépendamment de tous les autres tirages. Dans ce cas, $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov homogène de matrice de transition

$$P = |\Lambda|^{-1} \sum_{m \in \Lambda} P^{(m)}.$$

On a alors clairement

$$\pi_x P_{xy} = \pi_y P_{yx},$$

et donc si P est irréductible, π est l'unique probabilité invariante de la chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$. Notons que l'irréductibilité est assurée avec les deux choix décrits ci-dessus pour $R^{(m)}$, et un tirage uniforme du site à chaque pas.

3.1.2 Le modèle d'Ising

Il s'agit d'un des modèles les plus classiques en physique statistique. $N \in \mathbb{N}$ étant fixé (N "grand"), posons

$$\Lambda = \{-N, \dots, -1, 0, 1, \dots, N\}^2 \subset \mathbf{Z}^2,$$

($\Lambda = \Lambda_N$), de frontière $\partial\Lambda = \Lambda_N \setminus \Lambda_{N-1}$, et définissons l'espace des configurations comme

$$E = \{-1, 1\}^\Lambda.$$

Pour $x \in E$, on pose

$$H(x) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m, m' \in \Lambda \\ |m-m'|=1}} |x(m) - x(m')|^2.$$

Notons que H est petit lorsque x tend à prendre la même valeur aux points voisins. On définit :

$$E^+ = \{x \in E; x(m) = 1, \forall m \in \partial\Lambda\}.$$

Pour tout $\beta > 0$ ($1/\beta$ s'interprète comme une température), on définit la probabilité sur E^+ :

$$\pi_x = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H(x)}, \quad x \in E^+,$$

avec bien sûr

$$Z(\beta) = \sum_{x \in E^+} e^{-\beta H(x)},$$

quand $\beta \rightarrow 0$, π tend vers la mesure uniforme sur E^+ , alors que lorsque $\beta \rightarrow +\infty$, π tend vers la mesure uniforme sur les minima globaux de H , i. e. ici la masse de Dirac au point dont toutes les coordonnées valent 1. Un résultat célèbre d'Onsager dit que si X est une v.a. à valeurs dans E , de loi π , alors

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}X(0) = [(1 - (\sinh 2\beta)^{-4})^+]^{1/8}.$$

lorsque $\sinh 2\beta \leq 1$, on obtient que pour N très grand, la loi de $X(0)$ n'est guère influencée par la condition au bord choisie (i. e. le choix des valeurs de $\{x(m), m \in \partial\Lambda\}$), alors que l'inverse est vrai même à la limite $N \rightarrow \infty$ si $\sinh 2\beta > 1$.

Les physiciens sont très intéressés à réaliser des simulations sous la probabilité π pour N grand (pour tenter d'observer des phénomènes, du type du résultat d'Onsager, mais que l'on ne sait pas encore démontrer concernant éventuellement des modèles plus compliqués et moins bien connus que le modèle d'Ising). Mais pour N vraiment grand, il est impossible de simuler directement selon la loi π . Il est même quasiment impossible de calculer la constante de normalisation $Z(\beta)$. Nous allons décrire la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov dans une version parallélisable, qui exploite la forme particulière du modèle d'Ising.

Décrivons tout d'abord *l'échantillonneur de Gibbs*. Considérons une partition de Λ suivant la parité de la somme de deux coordonnées du point m considéré :

$$\begin{aligned} \Lambda^+ &= \{(m_1, m_2) \in \Lambda; m_1 + m_2 \text{ est pair}\} \\ \Lambda^- &= \{(m_1, m_2) \in \Lambda; m_1 + m_2 \text{ est impair}\} \end{aligned}$$

Pour $x \in E$, on note :

$$\begin{aligned} x^+ &= (x(m), m \in \Lambda^+), \\ x^- &= (x(m), m \in \Lambda^-) \end{aligned}$$

Il résulte de la forme du modèle d'Ising que $\pi_{+-}(x^+|x^-)$, la probabilité que $X^+ = x^+$, sachant que $X^- = x^-$, si X est une v.a. de loi π , est de la forme (on

utilise la notation \propto pour dire que deux fonctions sont égales à une constante de normalisation près) :

$$\pi_{+-}(x^+|x^-) \propto \prod_{m \in \Lambda^+ \setminus \partial\Lambda} e^{\beta x(m)s(m)},$$

avec, si $m \in \Lambda^+ \setminus \partial\Lambda$,

$$s(m) = \sum_{m'; |m'-m|=1} x^-(m').$$

On a une formule analogue pour $\pi_{-+}(x^-|x^+)$.

La facilité de simuler suivant ces deux lois provient de leur forme produit, et la constante de normalisation pour chaque facteur est explicite.

La procédure est maintenant la suivante. On choisit une configuration arbitraire X_0 dans E^+ . Ensuite, on utilise la procédure récurrente suivante. Etant donné X_n , on simule d'abord X_{n+1}^+ suivant la loi $\pi_{+-}(\cdot|X_n^-)$, puis X_{n+1}^- suivant la loi $\pi_{-+}(\cdot|X_{n+1}^+)$.

Cette procédure est exactement l'échantillonneur de Gibbs de la section précédente, où l'on visite alternativement tous les sites de $\Lambda^+ \setminus \partial\Lambda$, puis ceux de $\Lambda^- \setminus \partial\Lambda$ (avec une numérotation différente de la suite X_n). La convergence résulte de la discussion générale ci-dessus. Il n'est pas difficile de vérifier que l'on simule ici une chaîne de Markov irréductible dont π est bien la probabilité invariante.

Décrivons maintenant *l'algorithme de Metropolis*. Sachant que $X_n = x$, indépendamment pour chaque $m \in \Lambda^+ \setminus \partial\Lambda$, on change le signe de $x(m)$ avec la probabilité

$$p(m, x) = \frac{\pi(x_m)}{\pi(x)} \wedge 1 = e^{-2\beta x(m)s(m)} \wedge 1,$$

avec $x_m \stackrel{m}{\sim} x$, $x_m(m) = -x(m)$, et $s(m) = \sum_{|m'-m|=1} x^-(m')$.

On a ainsi obtenu $X_{n+1}^+(m)$. On simule ensuite $X_{n+1}^-(m)$ en conditionnant par la valeur de $X_{n+1}^+(m)$. Le processus obtenu $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ est bien une chaîne de Markov irréductible, de probabilité invariante π .

3.1.3 Analyse bayésienne d'images

On peut utiliser le modèle d'Ising (ou d'autres modèles de ce type) comme loi a priori d'une image bidimensionnelle digitalisée. Chaque point $m \in \Lambda$ est

un “pixel” (en français! pixel=picture element). $x(m)$ est le niveau de gris du pixel m (ici avec le modèle d’Ising on n’a que deux niveaux de gris : blanc et noir). En faisant varier le paramètre β du modèle d’Ising, on varie la “texture” de l’image : plus β est grand, plus on favorise une image avec de grandes taches blanches et de grandes taches noires, alors que β plus petit favorise un mélange plus fin de couleurs.

On observe la couleur (blanche ou noire) de chaque pixel, et l’observation restitue la couleur effective de chaque pixel avec la probabilité $p \in]0, 1[$, les erreurs de mesures éventuelles sur les différents pixels étant indépendantes.

Alors la loi a posteriori, plus précisément la loi conditionnelle de l’événement $X = x$, sachant que l’on a observé la configuration y , est

$$\pi(x|y) \propto e^{-\beta H(x)} p^{a(x,y)} (1-p)^{d(x,y)},$$

où $a(x, y)$ est le nombre de sites où les configurations x et y sont en accord (i.e. identiques) et $d(x, y)$ le nombre de sites où elles sont en désaccord (i.e. différentes).

On obtient une image “nettoyée des erreurs d’observation” en simulant selon la probabilité $\pi(x|y)$. Bien qu’il ne s’agisse plus exactement du modèle d’Ising, les mêmes méthodes s’appliquent. Décrivons l’algorithme de Metropolis. Sachant que $X_n = x$, indépendamment pour chaque site $m \in \Lambda^+ \setminus \partial\Lambda$ on change le signe de $X_n^+(m)$ avec la probabilité

$$\begin{aligned} p(m, x, y) &= \frac{\pi(x_m|y)}{\pi(x|y)} \wedge 1 \\ &= e^{-2\beta x(m)s(m)} \left(\frac{1-p}{p} \right)^{x(m)y(m)} \wedge 1, \end{aligned}$$

obtenant ainsi X_{n+1}^+ . On simule ensuite X_{n+1}^- en utilisant sur $\Lambda^+ \setminus \partial\Lambda$, les valeurs ainsi obtenues. On fabrique ainsi une chaîne de Markov irréductible, de probabilité invariante $\pi(\cdot|y)$.

3.1.4 Chaînes chauffées

La convergence de l’algorithme MCCM requiert que la chaîne simulée visite suffisamment souvent tous les états. Or la forme de la probabilité de transition peut être telle que la chaîne a tendance à rester piégée très longtemps dans certaines zones de l’espace des états. Supposons pour fixer les idées que

$E = \mathbf{Z}$ (ou un intervalle de \mathbf{Z} , ou \mathbf{Z}/N), et que $R_{x,x+1} = R_{x,x-1} = 1/2$.
Posons

$$H(x) = -\log(\pi_x).$$

On peut choisir comme matrice de transition P de la chaîne à simuler la matrice

$$P_{xy} = \begin{cases} \frac{1}{2} \exp[H(x) - H(y)], & \text{si } y = x \pm 1, \\ 1 - \frac{1}{2} \exp[H(x) - H(x+1)] - \frac{1}{2} \exp[H(x) - H(x-1)], & \text{si } y = x, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Supposons que deux zones A et B de \mathbf{Z} où π prend des valeurs significatives sont séparées par un intervalle où la valeur de π est très petite (i. e. où H prend des valeurs gigantesques). Alors la chaîne simulée aura tendance à passer trop rarement de A vers B (ainsi que de B vers A). Une solution est de définir d'autres matrices de transition telles que

$$P_{\beta,xy} = \frac{1}{2} \exp[\beta(H(x) - H(y))], \quad \text{si } y = x \pm 1,$$

avec $0 < \beta < 1$. La chaîne correspondante est dite "chauffée" (β s'interprète comme l'inverse d'une température). On simule alors en parallèle la chaîne $\{X_n\}$ correspondant à $\beta = 1$, et les chaînes $\{X_n^1\}, \dots, \{X_n^k\}$, correspondant à des valeurs $1 > \beta_1 > \beta_2 > \dots > \beta_k > 0$. Clairement, ces chaînes ont d'autant moins tendance à rester piégées dans certaines zones de l'espace d'état que β est petit. L'idée est alors de permuter de temps en temps de façon aléatoire les valeurs de $(X_n, X_n^1, \dots, X_n^k)$, de façon à ce que X_n visite plus rapidement l'espace d'états E . Bien sûr, dans le calcul final, on ne retient que les valeurs de $\{X_n, n \geq 0\}$ ainsi obtenues.

3.2 Simulation de la probabilité invariante

Un problème dans les algorithmes "MCCM" est le choix de la durée de la simulation. Par rapport à une méthode de Monte Carlo standard, on rajoute une difficulté, qui est qu'au lieu d'initialiser la chaîne de Markov sous sa probabilité invariante, on part d'un point arbitraire. D'une certaine façon on peut penser qu'il y a une "phase initiale" de l'algorithme qui permet de se rapprocher de la probabilité invariante, puis un problème de contrôle de la vitesse de convergence dans le théorème ergodique, qui - comme dans

une méthode de Monte Carlo standard - peut se résoudre par utilisation du théorème de la limite centrale correspondant (cf. Théorème 2.5.8).

On discutera de la vitesse de convergence vers la mesure invariante à la section suivante. Nous allons d'abord présenter des idées dûes à Propp et Wilson [36], qui permettent une simulation "parfaite" (au sens de "exacte", par opposition à "approchée") sous la probabilité invariante. L'idée est que l'on peut atteindre celle-ci en un nombre fini (mais aléatoire) d'itérations.

On suppose dans toute cette section que $\text{card}E < \infty$, et pour fixer les notations que $E = \{1, 2, \dots, N\}$.

3.2.1 Simulation parfaite

On va supposer dans cette section que

$$\beta(P) = \sum_{y \in E} \inf_{x \in E} P_{xy} > 0,$$

c'est à dire qu'il existe $y \in E$ tel que $P_{xy} > 0, \forall x \in E$. Cette condition n'est autre que la condition (D) de la section 2.6, mais avec la restriction $n_0 = 1$.

Il est clair que $\beta(P) \leq 1$. On pose

$$\nu_y = \frac{\inf_x P_{xy}}{\beta(P)}, y \in E,$$

donc ν est une probabilité sur E .

Remarque 3.2.1. *On pourrait choisir un autre couple (β, ν) ; $\beta > 0$, ν probabilité sur E tels que $P_{xy} \geq \beta\nu_y$, mais le choix ci-dessus est optimal au sens où il maximise β .*

Remarque 3.2.2. *L'hypothèse $\beta(P) > 0$ entraîne qu'il existe une unique classe récurrente (cf. l'exercice 2.9.5), et P possède une et une seule probabilité invariante.*

On va choisir une fonction

$$F : E \times [0, 1] \rightarrow E$$

telle que si U est une v.a. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$,

$$\mathbb{P}(F(x, U) = y) = P_{xy}, \quad x, y \in E.$$

Donc si $\{U_n, n \in \mathbb{N}\}$ est une suite de v.a. i.i.d. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, indépendante de X_0 ,

$$X_n = F(X_{n-1}, U_n), \quad n \geq 1$$

définit une chaîne de Markov de matrice de transition P .

On définit $\ell : \{0\} \cup E \rightarrow [0, \beta(P)]$ par

$$\begin{aligned} \ell(0) &= 0 \\ \ell(y) &= \ell(y-1) + \inf_x P_{xy}, \quad 1 \leq y \leq N, \end{aligned}$$

et on pose $J(y) = [\ell(y-1), \ell(y))$.

On définit en outre $k : E \times (\{0\} \cup E) \rightarrow [\beta(P), 1]$ par

$$\begin{aligned} k(x, 0) &= \beta(P) \\ k(x, y) &= k(x, y-1) + P_{xy} - \inf_z P_{zy}, \quad 1 \leq y \leq N, \end{aligned}$$

et on pose $K(x, y) = [k(x, y-1), k(x, y))$, $1 \leq x, y \leq N$,

$$I(x, y) = J(y) \cup K(x, y).$$

On remarque que $|I(x, y)| = P_{xy}$. Enfin on pose

$$F(x, u) = \sum_{y \in E} y \mathbf{1}_{\{u \in I(x, y)\}}, \quad 1 \leq x \leq N, \quad u \in [0, 1].$$

Remarquons que l'on a bien $\mathbb{P}(F(x, U) = y) = P_{xy}$, soit

$$\mathbb{P}(F(X_{n-1}, U_n) = y | X_{n-1} = x) = P_{xy}.$$

Le point crucial de cette construction est que si à l'instant n , $U_n < \beta(P)$, alors la valeur de X_n ne dépend pas de X_{n-1} .

Autrement dit, si on fait fonctionner en parallèle cet algorithme avec la même suite $\{U_n\}$ pour différents points de départ X_0 , les différentes suites confluent au premier instant n où $U_n < \beta(P)$. On a la

Proposition 3.2.3. *Soit $T = \inf\{n \geq 1, U_n < \beta(P)\}$. Alors T et X_T sont indépendantes, T de loi géométrique de paramètre $\beta(P)$, et X_T de loi ν .*

PREUVE

$$\{X_T = x, T = n\} = \{U_1 \geq \beta(P), \dots, U_{n-1} \geq \beta(P), U_n \in J(x)\}$$

Donc

$$\mathbb{P}(X_T = x, T = n) = (1 - \beta(P))^n \beta(P) \mu_x$$

□

On va maintenant construire une chaîne stationnaire de matrice de transition P .

On se donne une suite i.i.d. $\{U_n, n \in \mathbf{Z}\}$ de v.a. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, et on pose

$$N_k = \mathbf{1}_{\{U_k < \beta(P)\}}, \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Les $\{N_k\}$ sont des v.a. de Bernoulli indépendantes.

Pour tout $n \in \mathbf{Z}$, on pose

$$\tau(n) = \max\{k \leq n; U_k < \beta(P)\}.$$

Notons que $\tau(k) = \tau(n)$, $\forall k \in [\tau(n), n]$. En outre, on a $\mathbb{P}(n - \tau(n) > k) = (1 - \beta(P))^k$.

On définit alors le processus $\{X_n, n \in \mathbf{Z}\}$ comme suit. $\forall k \in \mathbf{Z}$ tel que $N_k = 1$, on pose

$$X_k = \sum_{y \in E} y \mathbf{1}_{\{U_k \in J(y)\}}.$$

Soit maintenant k tel que $N_k = 0$. $X_{\tau(k)}$ est défini par la formule ci-dessus. En outre,

$$X_{\tau(k)+1} = F(X_{\tau(k)}, U_{\tau(k)+1}), \dots, X_k = F(X_{k-1}, U_k).$$

Proposition 3.2.4. *Le processus $\{X_n, n \in \mathbf{Z}\}$ ainsi défini est stationnaire (i.e. $\forall \ell \in \mathbf{Z}, k \in \mathbb{N}, (X_{\ell+1}, \dots, X_{\ell+k}) \simeq (X_1, \dots, X_k)$, au sens où ces deux vecteurs ont la même loi).*

En particulier, la loi de X_0 est l'unique probabilité invariante de la chaîne de matrice de transition P .

PREUVE Il suffit de montrer le dernier point. On note

$$P_{xy} = (1 - \beta) \hat{P}_{xy} + \beta \nu_y.$$

On a

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(X_0 = x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}(X_0 = x, \tau(0) = -k) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}(X_0 = x | \tau(0) = -k) (1 - \beta)^k \beta \\ &= \beta \sum_{k=0}^{\infty} (\nu \hat{P}^k)_x (1 - \beta)^k\end{aligned}$$

Or si l'on pose $\mu_x = \mathbb{P}(X_0 = x)$, on a

$$\begin{aligned}\mu P &= \beta \sum_{k=0}^{\infty} (\nu \hat{P}^k)_x (1 - \beta)^k P \\ &= \beta \sum_{k=0}^{\infty} (\nu \hat{P}^{k+1})_x (1 - \beta)^{k+1} + \beta \nu \\ &= \mu,\end{aligned}$$

donc la loi de X_0 est bien la probabilité invariante par P . □

Algorithme de “simulation parfaite”

1. On simule $U_0, U_{-1}, \dots, U_{\tau(0)}$ (ceci requiert un nombre de simulations qui suit une loi géométrique).
2. On calcule $X_{\tau(0)} = \sum_y y \mathbf{1}_{\{U_{\tau(0)} \in J(y)\}}$.
3. On calcule $X_{\tau(0)+1}, \dots, X_0$ à l'aide de la formule $X_n = F(X_{n-1}, U_n)$, et des $U_{\tau(0)+1}, \dots, U_0$ générés ci-dessus.
4. La v.a. X_0 ainsi simulée suit la loi invariante sous P .

Remarque 3.2.5. *La limite de cette approche est que l'on a besoin que $\beta(P) > 0$.*

On pourrait penser généraliser cette approche au cas où il existe $k \geq 1$ tel que $\beta(P^k) > 0$, mais il ne semble pas que cela conduise à un algorithme effectivement utilisable.

3.2.2 Couplage depuis le passé

On suppose ici seulement que P est irréductible. On se donne une application

$$F : E \times [0, 1] \rightarrow E$$

tel que si U est une v.a. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$,

$$\mathbb{P}(F(x, U) = y) = P_{xy}, \quad \forall x, y \in E.$$

On va définir un “couplage multiple” On se donne $\{U_n^i, 1 \leq i \leq N, n \in \mathbf{Z}\}$ une suite de v.a. i.i.d. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, et pour $k \in \mathbf{Z}$, on pose

$$X_n^{1,k} = \begin{cases} 1, & \text{si } n = k \\ F(X_{n-1}^{1,k}, U_n^1), & \text{si } n > k; \end{cases}$$

$$X_n^{2,k} = \begin{cases} 2, & \text{si } n = k \\ F(X_{n-1}^{2,k}, U_n^2), & \text{si } n > k \text{ et } X_{n-1}^{2,k} \neq X_{n-1}^{1,k} \\ F(X_{n-1}^{2,k}, U_n^1), & \text{si } n > k \text{ et } X_{n-1}^{2,k} = X_{n-1}^{1,k}; \end{cases}$$

.....

$$X_n^{N,k} = \begin{cases} N, & \text{si } n = k \\ F(X_{n-1}^{N,k}, U_n^N), & \text{si } n > k \text{ et } X_{n-1}^{N,k} \notin \{X_{n-1}^{1,k}, \dots, X_{n-1}^{N-1,k}\} \\ F(X_{n-1}^{N,k}, U_n^{i_N}), & \text{si } n > k, X_{n-1}^{N,k} \in \{X_{n-1}^{1,k}, \dots, X_{n-1}^{N-1,k}\} \\ & \text{et } i_N = \inf\{i; X_{n-1}^{i,k} = X_{n-1}^{N,k}\} \end{cases}$$

On définit le temps d'arrêt

$$S_k = \inf\{\ell > k; X_\ell^{1,k} = X_\ell^{2,k} = \dots = X_\ell^{N,k}\},$$

et pour tout $n \in \mathbf{Z}$, on pose

$$\tau(n) = \sup\{k \leq n; S_k \leq n\}.$$

$\tau(n)$ est le plus grand des instants tels que l'état du processus (quel que soit son numéro entre 1 et N) à l'instant n ne dépend pas des états passés avant $\tau(n)$, puisque à l'instant $\tau(n)$ le processus numéro k valait k , et à l'instant n sa valeur ne dépend pas de son numéro.

Théorème 3.2.6. Soit $k \in \mathbf{Z}$ et $(X_n^{1,k}, \dots, X_n^{N,k}; n \geq k)$ le couplage multiples défini ci-dessus. Supposons que $\mathbb{P}(\tau(0) > -\infty) = 1$. Alors pour tout $x \in E$, la loi de $X_0^{x, \tau(0)}$ est la probabilité invariante par P .

PREUVE Si $k \in \mathbf{Z}$, $y \in E$,

$$\mathbb{P}(\{X_0^{x, \tau(0)} = y\} \cap \{\tau(0) > k\}) = \mathbb{P}(\{X_0^{x,k} = y\} \cap \{\tau(0) > k\}).$$

Donc

$$\mathbb{P}(X_0^{x, \tau(0)} = y) = \lim_{k \rightarrow -\infty} \mathbb{P}(X_0^{x,k} = y).$$

Soit π la probabilité invariante par P .

$$\begin{aligned} |\mathbb{P}(X_0^{x,k} = y) - \pi_y| &= |\mathbb{P}(X_0 = y | X_k = x) - \sum_{z \in E} \pi_z \mathbb{P}(X_0 = y | X_k = z)| \\ &\leq \sum_{z \in E} \pi_z |\mathbb{P}(X_0 = y | X_k = x) - \mathbb{P}(X_0 = y | X_k = z)| \\ &\leq \left(\sum_{z \in E} \pi_z \right) \mathbb{P}(\tau(0) < k) \end{aligned}$$

$$\rightarrow 0, \text{ quand } k \rightarrow -\infty$$

Algorithme de couplage depuis le passé

On choisit $k \in \mathbf{Z}_-$

1. On génère $U_k^i, U_{k+1}^i, \dots, U_0^i$, $1 \leq i \leq N$.
2. On construit à l'aide de la suite précédente, et de l'algorithme ci-dessus,

$$(X_\ell^{1,k}, \dots, X_\ell^{N,k}, \ell = k, k+1, \dots, 0).$$

3. On teste si oui ou non

$$X_0^{1,k} = X_0^{2,k} = \dots = X_0^{N,k}.$$

Si **oui**, alors $X_0^{1,k}$ est une réalisation de la probabilité invariante μ .

Si **non**, on repart plus loin dans le passé. Pour ce faire, on génère

$$U_{2k}^i, U_{2k+1}^i, \dots, U_{k-1}^i; 1 \leq i \leq N,$$

en utilisant cette suite et la précédente on construit

$$(X_\ell^{1,2k}, \dots, X_\ell^{N,2k}; \ell = 2k, \dots, 0),$$

et on continue comme ci-dessus. Notons qu'il est important d'emboîter les deux suites dans l'ordre indiqué, puisque le principe consiste à remonter dans le passé.

Il reste à donner des conditions qui assurent que $\mathbb{P}(\tau(0) > -\infty) = 1$). On a le

Théorème 3.2.7. *Si P est apériodique, alors l'algorithme ci-dessus vérifie $\mathbb{P}(\tau(0) > -\infty) = 1$.*

PREUVE Le résultat se démontre comme à l'étape 1 de la preuve du Théorème 2.6.4.

Remarque 3.2.8. *Dans le cas $\beta(P) > 0$, on obtient une variante de l'algorithme de simulation parfaite de la section 3.2.1 en appliquant la procédure de cette section, simplifiée comme suit. On simule une seule suite $(U_n, n \in \mathbf{Z})$, et on utilise la formule de récurrence*

$$(X_n^{1,k}, \dots, X_n^{N,k}) = \begin{cases} (1, \dots, N), & \text{si } n = k; \\ (F(X_{n-1}^{1,k}, U_n), \dots, F(X_{n-1}^{N,k}, U_n)), & \text{si } n > k. \end{cases}$$

3.3 Vitesse de convergence vers la probabilité invariante

L'algorithme de couplage par le passé n'est pas envisageable dans la plupart des situations concrètes. Beaucoup d'utilisateurs de la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov rejettent les n premières itérations du calcul (procédure dite "burn in" en Anglais), en espérant que la loi de X_{n+1} est "proche" de la probabilité invariante. Le problème est évidemment de choisir correctement le nombre n . Le Théorème 2.6.7 peut servir de guide, surtout si l'on sait calculer le β optimal. Mais ce résultat n'est le plus souvent pas assez précis. C'est une borne supérieure de la distance à la probabilité invariante, qui peut être assez loin de la distance réelle. En outre, ses hypothèses ne sont pas nécessairement satisfaites.

Plusieurs auteurs, dont en particulier Diaconis [12], ont montré que dans beaucoup de situations la distance en variation totale entre la loi de X_n et

la probabilité invariante évolue comme suit. Pendant une phase initiale, la décroissance est très lente, et la distance reste proche de 1. Puis il y a une décroissance brutale en quelques itérations vers zéro, suivie d'une convergence lente vers zéro. Dans une telle situation, après les quelques premières itérations, le résultat reste très mauvais, puis soudain il s'améliore brutalement, et lorsque l'on a atteint la fin de la phase de décroissance rapide, prolonger les calculs n'apporte plus grand chose. Le problème est alors de connaître précisément le nombre d'itérations qu'il faut effectuer pour atteindre la fin de la phase de décroissance rapide. Les auteurs cités ci-dessus donnent des résultats très précis dans quelques problèmes, par exemple le battage d'un jeu de cartes, mais bien sûr dans la plupart des cas intéressants en pratique, on n'a pas d'information aussi précise. Nous allons cependant décrire un résultat dû à Diaconis, Khare et Saloff-Coste [13], qui va nous donner l'occasion de présenter un exemple intéressant d'utilisation de la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov.

Supposons que l'on cherche à réaliser des simulations d'un vecteur aléatoire à valeurs dans $E = E_1 \times \cdots \times E_d$, de loi de probabilité

$$\mu(dx_1, \dots, dx_d) = f(x_1, \dots, x_d)\nu(dx_1, \dots, dx_d),$$

où la probabilité ν sur E est une probabilité produit, i. e.

$$\nu(dx_1, \dots, dx_d) = \nu_1(dx_1) \times \cdots \times \nu_d(dx_d).$$

On suppose que l'on ne dispose pas de méthode directe de simulation suivant la loi cherchée, mais que pour tout $x = (x_1, \dots, x_n)$ et tout $1 \leq i \leq d$, on sait simuler X_i de loi

$$\frac{f(x_1, \dots, x_{i-1}, y, x_{i+1}, \dots, x_d)\nu_i(dy)}{\int_{E_i} f(x_1, \dots, x_{i-1}, z, x_{i+1}, \dots, x_d)\nu_i(dz)}.$$

On construit alors une chaîne de Markov (si E n'est pas dénombrable, il s'agit d'une chaîne de Markov à valeurs dans un tel ensemble, ce qui sort de la théorie décrite dans cet ouvrage, mais on s'y ramène par discrétisation) dont chaque transition est donnée par la transformation du vecteur aléatoire X en le vecteur aléatoire X' , que nous allons maintenant décrire, en précisant la loi conditionnelle de X' , sachant que $X = x$.

La loi conditionnelle de X'_1 , sachant que $X = x$, est la loi

$$\frac{f(y, x_2, \dots, x_d)\nu_1(dy)}{\int_{E_1} f(z, x_2, \dots, x_d)\nu_1(dz)},$$

et pour $2 \leq i \leq d$, la loi conditionnelle de X'_i , sachant que $X = x$ et que $(X'_1, \dots, X'_{i-1}) = (x'_1, \dots, x'_{i-1})$ est la loi

$$\frac{f(x'_1, \dots, x'_{i-1}, y, x_{i+1}, \dots, x_d) \nu_i(dy)}{\int_{E_i} f(x'_1, \dots, x'_{i-1}, z, x_{i+1}, \dots, x_d) \nu_i(dz)}.$$

Dans la proposition qui suit, on suppose E dénombrable, et on écrit $\mu(x)$ (resp. $\nu(x)$) pour $\mu(\{x\})$ (resp. $\nu(\{x\})$).

Proposition 3.3.1. *Si E est dénombrable et $\mu(x) > 0$, pour tout $x \in E$, alors la chaîne de Markov de matrice de transition*

$$P_{xy} = \mathbb{P}(X' = y | X = x)$$

est irréductible, récurrente positive, et μ est son unique probabilité invariante.

PREUVE La condition $\mu(x) > 0, \forall x \in E$, entraîne clairement que la chaîne est irréductible. Il reste à montrer que la probabilité μ est invariante par P .

Or on a

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in E} \mu(x) P_{xy} &= \sum_{x_1, \dots, x_n} \frac{f(y_1, x_2, \dots, x_n) \nu_1(y_1)}{\sum_{z_1} f(z_1, x_2, \dots, x_n) \nu_1(z_1)} \\
&\times \frac{f(y_1, y_2, x_3, \dots, x_n) \nu_2(y_2)}{\sum_{z_2} f(y_1, z_2, x_3, \dots, x_n) \nu_2(z_2)} \\
&\times \dots \dots \dots \\
&\times \frac{f(y_1, \dots, y_{n-1}, x_n) \nu_{n-1}(y_{n-1})}{\sum_{z_{n-1}} f(y_1, \dots, z_{n-1}, x_n) \nu_{n-1}(z_{n-1})} \\
&\times \frac{f(y_1, \dots, y_{n-1}, y_n) \nu_n(y_n)}{\sum_{z_n} f(y_1, \dots, y_{n-1}, z_n) \nu_n(z_n)} \\
&\times f(x_1, \dots, x_n) \nu_1(x_1) \times \dots \times \nu_n(x_n) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_n} \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_n) \nu_1(x_1)}{\sum_{z_1} f(z_1, x_2, \dots, x_n) \nu_1(z_1)} \\
&\times \frac{f(y_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \nu_2(x_2)}{\sum_{z_2} f(y_1, z_2, x_3, \dots, x_n) \nu_2(z_2)} \\
&\times \dots \dots \dots \\
&\times \frac{f(y_1, \dots, y_{n-1}, x_n)}{\sum_{z_n} f(y_1, \dots, y_{n-1}, z_n) \nu_n(z_n)} \\
&\times f(y_1, \dots, y_{n-1}, y_n) \nu_1(y_1) \times \dots \times \nu_n(y_n) \\
&= \mu(y),
\end{aligned}$$

où la deuxième égalité s'obtient en réarrangeant les termes. La troisième s'obtient en remarquant d'abord que seul le premier facteur dépend de x_1 et que sa somme sur $x_1 \in E_1$ vaut 1, puis que dans l'expression restante seul le premier facteur dépend de x_2 , et sa somme sur $x_2 \in E_2$ vaut 1, etc. \square

Diaconis, Khare et Saloff-Coste [13] étudient en particulier le cas suivant avec $n = 2$:

- $E_1 = \{0, 1, \dots, m\}$, $E_2 = [0, 1]$, ν_1 (resp. ν_2) est la probabilité uniforme sur E_1 (resp. E_2).
- $f(k, p) = C_m^k p^k (1-p)^{m-k}$,

avec $m \in \mathbb{N}^*$ arbitraire. Leur résultat dans cet exemple est que le nombre d'itérations qu'il faut effectuer pour que la loi de la chaîne soit proche de sa probabilité invariante est de l'ordre de m .

3.4 Le recuit simulé

La recherche des maxima globaux d'une fonction est un des problèmes importants en mathématiques appliquées.

Dans le cas d'une fonction différentiable sur \mathbb{R}^d , on peut partir d'un point arbitraire, et se déplacer dans la direction du gradient, tant que la fonction décroît. Malheureusement une telle méthode conduit à trouver un minimum local, et non global. Dans le cas d'une fonction définie sur un ensemble fini E , on pourrait en principe calculer les valeurs $f(x)$ pour tout x dans E , mais dans les cas intéressants, une telle procédure n'est pas envisageable, en raison de la taille de l'ensemble E .

Nous allons présenter dans cette section la méthode du "recuit simulé", qui par rapport à la méthode du gradient introduit des perturbations aléatoires qui permettent de sortir des bassins d'attraction des minima locaux.

Au cours des calculs, les perturbations aléatoires sont atténuées, de telle sorte que l'on espère finalement aboutir à un des minima globaux. La terminologie provient de l'analogie avec les procédés chimiques de fabrication de certains cristaux, qui si on les refroidit trop vite se figent dans un état différent de l'état désiré, lequel n'est atteint qu'à la suite d'un procédé impliquant un refroidissement très lent, avec éventuellement un réchauffement au cours du procédé.

Nous allons présenter l'algorithme du recuit dans le cas de la minimisation d'une fonction définie sur un ensemble fini E .

Commençons par présenter deux exemples de problème de minimisation d'une fonction sur un ensemble fini de cardinal gigantesque.

Exemple 3.4.1. Le voyageur de commerce. Soit $\{1, \dots, N\}$ un ensemble de N villes. Le voyageur doit passer dans chacune de ces villes, en partant de 1 et en revenant en 1. E est l'ensemble de tous les itinéraires possibles ($\text{card } E = (N - 1)!$). Un itinéraire est une suite

$$x = (x_1, \dots, x_N)$$

telle que $x_1 = 1$, et (x_2, \dots, x_N) constitue une permutation de $\{2, \dots, N\}$. La fonction coût à minimiser est (avec $x_{N+1} = 1$) :

$$V(x) = \sum_{k=1}^N d(x_k, x_{k+1}),$$

où $d(n, m)$ est la distance de la ville n à la ville m . La recherche des minima globaux de cette fonction V est un des problèmes classiques de la recherche opérationnelle.

Exemple 3.4.2. Restauration d'images. On reprend le modèle présenté à la section 3.1.3, et on souhaite, pour obtenir une image restaurée (i.e. dont on a supprimé les erreurs d'observation), trouver le maximum de la loi a posteriori, i.e. avec les notations du chapitre 2, à y fixé on cherche

$$\hat{x} = \arg \max_x e^{-\beta H(x)} p^{a(x,y)} (1-p)^{d(x,y)}.$$

Supposons que l'on cherche à maximiser une fonction

$$U : E \rightarrow \mathbb{R}_-,$$

telle que, pour fixer les idées,

$$\max_{x \in E} U_x = 0.$$

On cherche un des x tels que $U_x = 0$.

Pour tout $\beta > 0$, on définit la probabilité π_β sur E par :

$$\pi_{\beta,x} = Z_\beta^{-1} e^{\beta U_x}, \quad x \in E$$

avec $Z_\beta = \sum_{x \in E} e^{\beta U_x}$. Le paramètre β est destiné à tendre vers $+\infty$. Quand $\beta \rightarrow +\infty$, la probabilité π_β converge vers la probabilité uniforme sur les maxima de U .

A chaque $\beta > 0$, on associe la matrice de transition d'une chaîne de Markov irréductible et apériodique, de probabilité invariante π_β . On peut la choisir par exemple comme suit. Soit G un graphe non orienté dans E , i.e. une collection de paires de points de E . On suppose que G possède la propriété suivante : pour tout $x, y \in E$, il existe n et $x = x_1, x_2, \dots, x_n = y \in E$ tels que $(x_k, x_{k+1}) \in G$, $1 \leq k \leq n-1$. Posons

$$n_x = |\{y, (x, y) \in G\}|.$$

Alors la matrice P_β dont les éléments hors diagonaux sont donnés par

$$P_{\beta,xy} = \mathbf{1}_{(x,y) \in G} n_x^{-1} [e^{\beta(U_y - U_x)} \wedge 1],$$

et convenablement complétée sur la diagonale, a les propriétés requises. Notons que plus β est grand, plus les transitions qui diminuent la valeur de U sont rares. Pourvu que le choix du graphe G ne rende pas la chaîne périodique, si β est fixé et $\{X_n^\beta, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P_β , la loi de X_n^β converge vers π_β quand $n \rightarrow \infty$. L'idée de l'algorithme du recuit est de faire dépendre β de n , de telle sorte que $\beta \rightarrow +\infty$ quand $n \rightarrow \infty$, avec l'espoir que alors X_n converge vers le (ou l'ensemble des) maximum de la fonction U . Ceci est vrai si β tend suffisamment lentement vers $+\infty$ (d'où la terminologie "recuit"). Nous donnerons un résultat dans ce sens pour l'analogie d'une chaîne de Markov, mais en temps continu, à la section 7.10 ci-dessous.

3.5 Exercices

Exercice 3.5.1. Soit E un espace d'états dénombrable et p et q des densités de probabilité, avec $0 < p \leq cq$, q étant une densité facilement simulable. On considère alors une suite $Y_n, n \geq 1$ de variables aléatoires indépendantes et de même loi q , globalement indépendantes de la variable aléatoire X_0 . On définit par récurrence :

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_{n+1} & \text{avec probabilité } \frac{p(Y_{n+1})}{cq(Y_{n+1})} \\ X_n & \text{avec probabilité } 1 - \frac{p(Y_{n+1})}{cq(Y_{n+1})} \end{cases}$$

1. Ecrire X_{n+1} sous la forme $f(X_n, U_{n+1}, Y_{n+1})$, où les U_n sont i. i. d. de loi commune la loi uniforme sur $[0, 1]$, et en déduire que X_n est une chaîne de Markov.
2. Calculer la probabilité de transition P_{ij} de X_n .
3. Calculer μP pour une probabilité μ et en déduire que la loi de X_n converge vers une unique probabilité invariante égale à p .
4. Quel rapport y-a-t-il entre cette chaîne et la méthode de rejet classique ?

Exercice 3.5.2. Soit P_{xy} un noyau de transition d'une chaîne de Markov sur un espace d'état dénombrable E . On suppose que :

$$P_{xy} \geq \alpha c_y, \text{ pour tout } x \in E, \quad (3.2)$$

où c est une mesure de probabilité et $\alpha > 0$. On identifie l'ensemble des mesures bornées sur E à $\ell^1(E)$ muni de la norme $|\nu| = \sum_{x \in E} |\nu(x)|$

1. Soit ν une mesure bornée de masse totale nulle. Montrer que $|\nu P| \leq (1 - \alpha)|\nu|$. En déduire que si μ et μ' deux mesures de probabilité sur E on a :

$$|\mu P - \mu' P| \leq (1 - \alpha) |\mu - \mu'|.$$

2. Montrer que s'il existe une mesure de probabilité invariante, elle est forcément unique et que pour toute probabilité μ la suite μP^n est de Cauchy.
3. Soit $(X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov de matrice de transition P . Montrer que quelle que soit la loi initiale μ de X_0 , la loi de X_n converge vers une unique loi de probabilité invariante ν et que de plus :

$$|\mu P^n - \nu| \leq C \rho^n$$

où C est une constante finie et $0 < \rho < 1$.

4. Montrer que les résultats précédents sont conservés s'il existe $\ell \geq 1$:

$$P_{xy}^\ell \geq \alpha c_y, \text{ pour tout } x, y \in E. \quad (3.3)$$

5. On considère maintenant l'algorithme de Métropolis sur un espace E fini. On suppose que $P_{xy} = P_{yx}$ et que l'équation (3.2) est vérifiée. On cherche à simuler une loi μ donnée à une constante près par :

$$\mu_x = C e^{-\beta H(x)}.$$

Écrire la probabilité de transition \tilde{P}_{xy} sur E qui permet de construire l'algorithme de Métropolis.

6. Vérifier que \tilde{P} vérifie l'équation (3.2). Proposer une méthode de simulation approchée selon la loi μ .

Exercice 3.5.3. On veut résoudre dans \mathbb{R}^d l'équation

$$(I - A)x = b \quad (3.4)$$

où A est une matrice de norme strictement inférieure à 1. Pour ceci on considère une chaîne de Markov X_n sur $E = \{1, 2, \dots, d\}$ de loi initiale μ strictement positive et de transition $P(i, j)$ strictement positive sur $E \times E$.

1. Pour $n \geq 1$ et $y \in \mathbb{R}^d$ on pose :

$$W_n = y(X_0) \frac{A(X_0, X_1) \cdots A(X_{n-1}, X_n)}{\mu(X_0) P(X_0, X_1) \cdots P(X_{n-1}, X_n)} b(X_n)$$

Calculer $\mathbb{E}(W_n)$. En déduire une simulation d'une solution approchée de l'équation (3.4).

2. On pose $\tilde{E} = E \cup \{\delta\}$ et on considère maintenant une chaîne avec cimetière δ . C'est à dire une chaîne \tilde{X}_n de loi initiale $\tilde{\mu}$ portée par E , strictement positive sur E et de transition $\tilde{P}(x, y)$ strictement positive sur $E \times \tilde{E}$ telle que $\tilde{P}(\delta, \delta) = 1$.

On pose $T = \inf\{n \geq 1 ; \tilde{X}_n = \delta\}$.

1. Montrer que T est fini presque sûrement.
2. On pose

$$W = y(\tilde{X}_0) \frac{A(\tilde{X}_0, \tilde{X}_1) \cdots A(\tilde{X}_{T-2}, \tilde{X}_{T-1})}{\tilde{\mu}(\tilde{X}_0) \tilde{P}(\tilde{X}_0, \tilde{X}_1) \cdots \tilde{P}(\tilde{X}_{T-2}, \tilde{X}_{T-1}) \tilde{P}(\tilde{X}_{T-1}, \tilde{X}_T)} b(\tilde{X}_{T-1})$$

Calculer $\mathbb{E}(W)$ et en déduire une simulation de la solution de l'équation (3.4).

Chapitre 4

Chaînes de Markov et génome

Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation de méthodes d’annotation du génome (en particulier la recherche des régions codantes, donc des gènes) et aussi d’alignement de séquences d’ADN, qui utilisent les chaînes de Markov. Ce chapitre contient en particulier une présentation des *chaînes de Markov cachées* et des algorithmes qui leur sont associés. Cette notion est utilisée dans de nombreuses applications autres que la génomique, par exemple en reconnaissance de la parole, cf. Jelinek [23]. On pourra consulter sur le sujet de ce chapitre entre autres [15], [16] et [31], dont nous nous sommes inspiré.

4.1 Comment lire l’ADN ?

On considère un fragment d’ADN, sous la forme d’un simple brin constitué d’une succession de nucléotides, que nous considérerons comme des lettres dans l’alphabet a, c, g, t , a pour *adénine*, c pour *cytosine*, g pour *guanine*, t pour *thymine*, par exemple

a c c g t a a t t c g g a . . . t t g c

“Lire” ou “annoter” cette séquence consiste essentiellement à la décomposer en *régions codantes à l’endroit* ou à *l’envers* (sachant que l’ADN est constitué en réalité de deux brins complémentaires, avec un a toujours apparié avec un t , un c avec un g , qui ne sont pas lus dans le même sens), et *régions non codantes*; dans le cas des génomes eukaryotes il faut en outre découper les

régions codantes en *introns* et *exons*. Notons que les régions codantes sont lues par codons, i.e. triplets de nucléotides, chaque codon étant ensuite traduit en un *acide aminé*. La succession des acides aminés constitue une *protéine*. Il est donc essentiel de lire chaque région codante dans la bonne *phase de lecture*. Oublier un codon n'est pas forcément très grave, mais se tromper en décalant la lecture d'un ou de deux nucléotides est catastrophique !

On est aidé dans cette démarche par la présence d'un codon START (resp. STOP) au début (resp. à la fin) de chaque région codante. Mais tout START potentiel n'en est pas forcément un. Par contre, un STOP potentiel, dans une région codante, rencontré dans la bonne phase de lecture, est un STOP. Et il n'y a pas de signaux aussi nets marquant la transition entre *intron* et *exon*.

Pour pouvoir faire la distinction entre plages codantes et non codantes, une première possibilité est que les proportions respectives de **a**, de **c**, de **g** et de **t** soient nettement différentes entre plage codante et non codante. Une seconde possibilité est que ces proportions ne sont pas vraiment nettement différentes, et qu'il faut compter les *di* ou *trinucléotides*.

Dans le premier cas, on va distinguer entre région codante et non codante en comparant les proportions de **a**, de **c**, de **g** et de **t**. Dans le second cas, il faudra compter les paires ou les triplets. Et quelque soit le critère adopté, le plus difficile est de localiser correctement les ruptures (ou changements de plage).

Les méthodes que nous venons d'évoquer pour décomposer une séquence d'ADN en ses différentes plages – dans le but de détecter les gènes – peuvent être vues comme des procédures statistiques associées à une modélisation probabiliste. Cette modélisation n'est pas la même suivant que l'on regarde des fréquences de *nucléotides*, de *bi-* ou de *trinucléotides*. Dans tous les cas, on considérera la suite des nucléotides comme une suite de *v. a.* à valeurs dans l'ensemble $E = \{\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{t}\}$.

Avant de faire un détour par les modèles probabilistes possibles pour une séquence d'ADN, considérons deux problèmes parmi les plus simples d'analyse de séquences.

4.1.1 Les îlots cpg

On note *cpg* le dinucléotide *c* suivi de *g* (la notation **c g** ou **c-g** désigne plutôt la paire de bases **c** et **g** appariée, chacune sur un brin de l'ADN). Dans le génome humain, ces dinucléotides ont tendance à disparaître, parce

que lorsque la cytosine c est suivie par la guanine g , elle a tendance à être modifiée par méthylation, et méthyl- c mute facilement en thymine t . D'où le fait que les dinucléotides cpg sont plus rares que ce que donne le produit de la fréquence des c par celle des g . Mais le processus de méthylation est inhibé dans certaines portions du génome, autour des promoteurs et des codons START. Dans ces régions on trouve beaucoup de cpg (en fait plus que le produit de la fréquence des c par celle des g). On appelle ces régions des "îlots cpg ".

On peut donc se poser deux questions. Etant donnée une petite portion de génome, comment décider s'il provient ou non d'un îlots cpg ? Etant donnée une longue séquence, comment isoler les îlots cpg ?

4.1.2 Recherche de gènes dans un génome prokaryote

Dans un génome prokaryote, un gène est une succession de codons (de trinuécléotides, qui chacun code pour un acide aminé), encadrés par un codon START et un codon STOP. Il y a trois codons START possibles, et trois codons STOP possibles. Mais alors qu'un codon STOP putatif dans la bonne phase de lecture est forcément un STOP, un codon START possible au milieu d'une région non codante n'est pas forcément un START.

On a donc dans un génome prokaryote des *gènes putatifs* constitués d'un codon START, un nombre entier de codons (ie. un multiple de 3 nucléotides), un codon STOP. Comment distinguer, parmi une collection de *gènes putatifs*, les *vrais gènes* des *faux gènes*? Comment trouver les gènes dans un génome prokaryote?

Remarque 4.1.1. *Dans les chapitres précédents, les suites aléatoires (en particulier les chaînes des Markov) étaient indexées par le temps $n = 0, 1, 2, \dots$. Dans ce chapitre, on va considérer des suites aléatoires indexées par la position n sur une séquence génomique. On aura $n = 1, 2, \dots$, c'est à dire que l'indice n part de la valeur 1, et non plus de la valeur 0.*

4.2 Le modèle i.i.d

Soit X_1 le premier nucléotide de notre séquence. Sa *loi de probabilité* est définie par le vecteur $p = (p_a, p_c, p_g, p_t)$ donné par

$$p_a = \mathbb{P}(X_1 = a), \quad p_c = \mathbb{P}(X_1 = c), \quad p_g = \mathbb{P}(X_1 = g), \quad p_t = \mathbb{P}(X_1 = t)$$

Notons que $p_a, p_c, p_g, p_t \geq 0$ et $p_a + p_c + p_g + p_t = 1$.

On dit que les v.a. (X_1, \dots, X_n) sont i.i.d. (indépendantes et identiquement distribuées) si elles sont indépendantes et toutes de même loi. On dit aussi (dans le langage des statisticiens) que la suite (X_1, \dots, X_n) est un échantillon de taille n de la loi commune des X_i . A cet échantillon, on associe la loi de probabilité empirique

$$p_a^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{X_i=a\}}, \quad p_c^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{X_i=c\}},$$

$$p_g^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{X_i=g\}}, \quad p_t^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{X_i=t\}}.$$

$p^n = (p_a^n, p_c^n, p_g^n, p_t^n)$ est une probabilité sur E .

En pratique, la loi commune $p = (p_a, p_c, p_g, p_t)$ des X_i est inconnue. Du moins si n est suffisamment grand, p^n est une bonne approximation de p . En effet, il résulte de la loi des grands nombres que

$$p_a^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{X_i=a\}} \rightarrow \mathbb{E}(\mathbf{1}_{\{X_1=a\}}) = \mathbb{P}(X_1 = a)$$

quand $n \rightarrow \infty$ (même résultat pour c, g, t), et en outre d'après le théorème de la limite centrale,

$$\mathbb{P} \left(-\delta \sqrt{\frac{p_a(1-p_a)}{n}} \leq p_a - p_a^n \leq \delta \sqrt{\frac{p_a(1-p_a)}{n}} \right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\delta}^{\delta} e^{-\frac{x^2}{2}} dx,$$

et donc puisque $\sqrt{p_a(1-p_a)} \leq \frac{1}{2}$,

$$\mathbb{P} \left(|p_a - p_a^n| > \frac{\delta}{2\sqrt{n}} \right) \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{\delta}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

On peut donc estimer la loi inconnue p , sous l'hypothèse que les nucléotides sont i.i.d., donc en particulier que la plage considérée est *homogène*.

L'hypothèse d'indépendance n'est pas forcément vérifiée, mais en réalité elle n'est pas absolument nécessaire pour que la démarche ci-dessus puisse être justifiée.

4.3 Le modèle de Markov

Supposer que les nucléotides sont indépendants les uns des autres n'est pas très raisonnable. On peut penser par exemple que, dans une région codante, la loi du 2ème nucléotide d'un codon dépend de quel en est le premier nucléotide.

D'où l'idée de supposer que la suite (X_1, \dots, X_n) forme une chaîne de Markov. Cependant, il est utile pour l'application au génome de considérer une propriété de Markov plus générale que ce que nous avons introduit jusqu'ici.

Définition 4.3.1. *La suite (X_1, \dots, X_n) est une chaîne de Markov d'ordre ℓ (≥ 1) (Modèle $M\ell$) si $\forall k > \ell$,*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_k = x_k | X_1 = x_1, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}) \\ = \mathbb{P}(X_k = x_k | X_{k-\ell} = x_{k-\ell}, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}) \end{aligned}$$

Notons qu'une suite indépendante constitue un modèle $M0$. Le modèle $M1$, est le modèle usuel, qui a été étudié dans les chapitres précédents. Remarquons que l'on peut toujours considérer un modèle Mk à valeurs dans E comme un modèle $M1$ à valeurs dans E^k .

4.3.1 Application aux îlots cpg

Les données ci-dessous sont reprises de [15]. On estime deux matrices de transition de Markov (modèle $M1$), d'une part sur des îlots cpg, et d'autre part sur des séquences qui ne sont pas des îlots cpg. Dans le premier cas, on obtient la matrice de transition estimée

$$P^+ = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} \text{a} & \text{c} & \text{g} & \text{t} \end{array} \\ \begin{array}{c} \text{a} \\ \text{c} \\ \text{g} \\ \text{t} \end{array} & \begin{array}{cccc} 0.180 & 0.274 & 0.426 & 0.120 \\ 0.171 & 0.368 & 0.274 & 0.188, \\ 0.161 & 0.339 & 0.375 & 0.125 \\ 0.079 & 0.355 & 0.384 & 0.182 \end{array} \end{array}$$

et dans le second cas

$$P^- = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} \text{a} & \text{c} & \text{g} & \text{t} \end{array} \\ \begin{array}{c} \text{a} \\ \text{c} \\ \text{g} \\ \text{t} \end{array} & \begin{array}{cccc} 0.300 & 0.205 & 0.285 & 0.210 \\ 0.322 & 0.298 & 0.078 & 0.302. \\ 0.248 & 0.246 & 0.298 & 0.208 \\ 0.177 & 0.239 & 0.292 & 0.292 \end{array} \end{array}$$

Etant donnée une séquence $x = (x_1, \dots, x_n)$ de nucléotides, on calcule un *score* qui est en fait un *log-rapport de vraisemblance* sous la forme

$$\begin{aligned} S(x) &= \log \frac{\mathbb{P}_{\text{modèle}^+}(X = x)}{\mathbb{P}_{\text{modèle}^-}(X = x)} \\ &= \sum_{i=2}^n \log \left(\frac{P_{x_{i-1}x_i}^+}{P_{x_{i-1}x_i}^-} \right) \\ &= \sum_{i=2}^n R_{x_{i-1}x_i}. \end{aligned}$$

On peut en fait normaliser ce score en le divisant par la longueur n de la séquence. La matrice des R est donnée par

	a	c	g	t
a	-0.740	0.419	0.580	-0.803
c	-0.913	0.302	1.812	-0.685
g	-0.624	0.461	0.331	-0.730
t	-1.169	0.573	0.393	-0.679

Lorsque l'on compare les $S(x)$ pour diverses séquences dont on sait s'il s'agit ou non d'ilôt cpg, on voit que le score ci-dessus discrimine bien les îlots cpg des autres types de séquence.

4.3.2 Recherche de gènes dans un génome prokaryote

On procède de façon analogue à ce que l'on vient de faire à la sous-section précédente. On a à notre disposition des *vrais gènes* et des *faux gènes*. On va en utiliser une partie pour l'*apprentissage du modèle*, et une autre pour tester le caractère discriminant ou non de tel *score*.

On utilise un premier sous-ensemble des *vrais gènes* pour estimer la matrice de transition d'une chaîne de Markov. Notons P^+ l'estimé obtenu. Le modèle “-” est un modèle i.i.d., la probabilité jointe des 4 nucléotides étant donnée par les 4 fréquences, calculée à partir d'un pool contenant à la fois des *vrais gènes* et des *faux gènes*. Notons π l'estimé obtenu.

Maintenant si x est un gène putatif, on calcule son score

$$\begin{aligned} S(x) &= \log \frac{\mathbb{P}_{\text{modèle}+}(X = x)}{\mathbb{P}_{\text{modèle}-}(X = x)} \\ &= \sum_{i=2}^n \log \left(\frac{P_{x_{i-1}x_i}^+}{\pi_{x_i}} \right) \\ &= \sum_{i=2}^n R_{x_{i-1}x_i}. \end{aligned}$$

Il s'avère que cette statistique discrimine très mal les vrais gènes des faux gènes.

Par contre, si l'on prend comme modèle + un modèle de Markov $M1$ sur les codons, et que l'on procède comme ci-dessus, alors la nouvelle statistique $S(x)$ discrimine bien les vrais gènes des faux gènes.

4.3.3 Statistique des chaînes de Markov Mk

Pour simplifier, on va se contenter de décrire le modèle $M2$. Dans ce cas, ce qui remplace la matrice P est une matrice de transition de $E \times E$ dans E , qui donne la loi de probabilité de X_{k+1} , sachant le couple (X_{k-1}, X_k) . Dans le cas $E = \{\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{t}\}$, on a donc une matrice de transition à 16 lignes (indexées par les dinucléotides $\{\mathbf{aa}, \mathbf{ac}, \dots, \mathbf{gt}, \mathbf{tt}\}$) et 4 colonnes (indexées par $\{\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{t}\}$).

Remarque 4.3.2. On peut aussi se ramener à un modèle $M1$ sur l'espace d'état $E \times E$, puisque si (X_1, X_2, \dots, X_n) est une chaîne de Markov d'ordre 2 à valeurs dans E , $((X_1, X_2), (X_2, X_3), \dots, (X_{n-1}, X_n))$ est une chaîne de Markov d'ordre 1 à valeurs dans $E \times E$. On se ramène à une matrice de transition carrée, et on peut introduire la notion de probabilité invariante...

On estime la probabilité de transition $P_{xy,z}$ à l'aide de la quantité

$$\frac{\sum_{k=1}^{n-2} \mathbf{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y, X_{k+2}=z\}}}{\sum_{k=1}^{n-2} \mathbf{1}_{\{X_k=x, X_{k+1}=y\}}},$$

qui converge p.s. vers $P_{xy,z}$ quand $n \rightarrow \infty$. Remarquons que cette statistique inclut le décompte des trinucleotides, donc en particulier des codons, ce qui fait que les chaînes d'ordre 2 sont très utilisées pour modéliser les régions codantes de l'ADN.

4.3.4 Chaîne de Markov phasée

Dans une “plage codante”, on peut penser que la probabilité de transition n’est pas indépendante du site, mais périodique de période 3. Comme la notion de “chaîne de Markov périodique” désigne tout autre chose (à savoir une chaîne qui n’est pas “apériodique” au sens de la définition 2.6.1), nous utiliserons, à la suite de [40], la terminologie *chaîne de Markov phasée* pour désigner une chaîne de Markov $(X_n, 1 \leq n \leq N)$ telle que pour tous $x, y \in E$, l’application $n \rightarrow P(X_{n+1} = y | X_n = x)$ est périodique. Dans le cas qui nous occupe, on peut y compris songer à une chaîne de Markov d’ordre 2, telle que pour tout $y \in E$, la quantité $P(X_{n+1} = y | X_n = x, X_{n-1} = x')$ ne dépende pas de x, x' pour $n = 3k$, que de x pour $n = 3k + 1$ et dépende de x, x' pour $n = 3k + 2$, k entier. Cela veut dire en particulier que les codons successifs sont i.i.d. On pourrait aussi supposer que les codons successifs forment une chaîne de Markov d’ordre 1.

4.3.5 Chaîne de Markov localement homogène

Si l’on regarde plus globalement la séquence génomique, on s’attend à ce que la chaîne de Markov qui décrit celle-ci soit homogène dans la réunion des régions non codantes, dans celle des régions codantes à l’endroit, celle des régions codantes à l’envers, la réunion des introns, mais pas globalement homogène, et c’est d’ailleurs cette inhomogénéité qui doit nous permettre de réaliser l’annotation. Le principal problème est bien de détecter ce que l’on appelle les “ruptures de modèle”.

Il existe une importante littérature statistique sur ces problèmes de rupture de modèle, mais il n’est pas clair que les algorithmes correspondant sont adaptables à la situation qui est la nôtre ici, où il est essentiel d’exploiter l’homogénéité de la chaîne sur la réunion des plages de même type (non codant, codant à l’endroit,...), et pas seulement sur chacune de ces plages prise isolément.

Nous allons présenter un algorithme dû à Audic et Claverie [1] pour l’annotation des génomes prokaryotes. On suppose que notre modèle (qui peut être M_0, M_1, M_2, \dots) est décrit par un paramètre θ (qui est une probabilité sur E dans le cas M_0 , une probabilité de transition dans le cas M_1, \dots), lequel prend trois valeurs distinctes (toutes trois inconnues!) $(\theta_0, \theta_1, \theta_2)$, suivant que l’on est dans une plage non codante, codante à l’endroit ou codante à l’envers.

- *Étape d'initialisation* On découpe la séquence en plages de longueur 100 (éventuellement, la dernière plage est de longueur > 100). On décide au hasard de placer chaque plage dans l'une des trois "boîtes" 0, 1, et 2. Sur la base de tous les X_n se trouvant dans la boîte 0, on estime une valeur du paramètre θ , soit $\theta_0^{(1)}$. On estime de même les valeurs $\theta_1^{(1)}$ et $\theta_2^{(1)}$.
- *Étape de mise à jour* Supposons que nos trois "boîtes" 0, 1, et 2 contiennent chacune des plages distinctes de longueur ≥ 100 , sur la base desquelles on a estimé les valeurs $\theta_0^{(n)}$, $\theta_1^{(n)}$ et $\theta_2^{(n)}$. On commence par vider ces boîtes, et on reprend la séquence complète $\{X_n, 1 \leq n \leq N\}$. On extrait la sous-suite $\{X_n, 1 \leq n \leq 100\}$. On estime le paramètre θ sur la base de cette sous-suite, et on choisit laquelle des trois valeurs $\theta_0^{(n)}$, $\theta_1^{(n)}$ et $\theta_2^{(n)}$ est la plus proche de cette nouvelle valeur estimée. Puis on se pose le même problème avec la suite $\{X_n, 10 \leq n \leq 110\}$, avec la suite $\{X_n, 20 \leq n \leq 120\}$,... jusqu'à ce que la valeur estimée devienne plus proche d'une autre des trois valeurs de l'étape précédente. Alors on revient en arrière de 50 nucléotides, et on place l'intervalle ainsi sélectionné depuis le début de la séquence dans la boîte 0, 1, ou 2, suivant le cas. On recommence, en prenant une plage de longueur 100, adjacente à l'intervalle que l'on vient de placer dans une des boîtes, et on répète les opérations précédentes. Lorsque l'on a épuisé la séquence, on se retrouve avec trois boîtes contenant chacune (du moins il faut l'espérer) des plages de longueur ≥ 100 . On estime alors les trois nouvelles valeurs $\theta_0^{(n+1)}$, $\theta_1^{(n+1)}$ et $\theta_2^{(n+1)}$, sur la base du contenu des boîtes 0, 1, et 2 respectivement.

Si la séquence initiale est effectivement constituée de plages dont les compositions statistiques sont de trois types différents, l'algorithme converge rapidement, et quand on s'arrête, on a un découpage de la séquence initiale en sous-séquences de trois types différents. Il ne reste plus qu'à décider "qui est qui", ce qui requiert des connaissances a priori, acquises en observant des séquences qui ont déjà été annotées.

4.4 Chaîne de Markov cachée

Le point de vue Bayésien consiste à se donner une loi de probabilité a priori sur les paramètres inconnu θ_i , et leur évolution. Plus précisément on

va maintenant se donner une nouvelle chaîne de Markov (Y_1, \dots, Y_N) , dite “cachée” parce que non observée. Dans le cas des génomes prokaryotes, la chaîne (Y_n) prend par exemple ses valeurs dans l’ensemble à trois éléments $F = \{0, 1, 2\}$, et dans le cas eukaryote il faut différencier les états 1 et 2 entre les parties *intron* et *exon*. En réalité c’est encore un peu plus compliqué, car il faudrait prendre en compte les codons START et STOP, mais on verra cela un peu plus loin. L’avantage de cette approche est que l’on dispose d’algorithmes pour répondre aux questions que nous nous posons. On note F l’espace dans lequel la chaîne cachée prend ses valeurs, et $d = \text{card}(F)$. Rappelons que $d \geq 3$.

Pour simplifier la présentation succincte de ces algorithmes, on va supposer que (Y_1, \dots, Y_N) est une chaîne de Markov (μ, P) à valeurs dans F , et que, connaissant les (Y_n) , la suite des nucléotides (X_1, \dots, X_N) est indépendante, la loi de chaque X_n dépendant uniquement du Y_n correspondant, i.e. pour tout $1 \leq n \leq N$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n | Y_1 = y_1, \dots, Y_n = y_n) \\ &= \prod_{k=1}^n \mathbb{P}(X_k = x_k | Y_k = y_k) \\ &= \prod_{k=1}^n Q_{y_k x_k}. \end{aligned}$$

Le problème que l’on cherche à résoudre est le suivant : ayant observé la suite des nucléotides (x_1, \dots, x_N) , quelle est la suite des états cachés (y_1^*, \dots, y_N^*) qui “explique le mieux” ces observations ? Autrement dit, il s’agit de calculer la suite qui maximise la vraisemblance de la loi a posteriori sachant les observations, i.e.

$$(y_1^*, \dots, y_N^*) = \underset{y_1, \dots, y_N}{\operatorname{argmax}} \mathbb{P}(Y_1 = y_1, \dots, Y_N = y_N | X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N).$$

Notons que, dans ce modèle, on a comme paramètres inconnus le triplet (μ, P, Q) . Pour résoudre le problème ci-dessus, on est obligé d’estimer d’abord les paramètres (mais nous discuterons ce problème à la fin). Si l’on admet que l’on connaît les paramètres, notre problème sera résolu par l’algorithme de Viterbi. Mais nous allons d’abord présenter le

4.4.1 Calcul de la vraisemblance

Il est clair, au vu de ce qui précède, que

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_\theta(Y_1 = y_1, X_1 = x_1, Y_2 = y_2, X_2 = x_2, \dots, Y_N = y_N, X_N = x_N) \\ &= \mu_{y_1} P_{y_1 y_2} \times \dots \times P_{y_{N-1} y_N} \times Q_{y_1 x_1} Q_{y_2 x_2} \times \dots \times Q_{y_N x_N}. \end{aligned}$$

Et donc

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_\theta(X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N) \\ &= \sum_{y_1, y_2, \dots, y_N \in F} \mu_{y_1} P_{y_1 y_2} \times \dots \times P_{y_{N-1} y_N} Q_{y_1 x_1} \times \dots \times Q_{y_N x_N} \end{aligned}$$

Mais cette formule n'est pas utilisable en pratique, car elle suppose d'effectuer de l'ordre de Nd^N opérations, ce qui, dès que N est un peu grand, devient irréalisable. On va maintenant voir une procédure récursive pour le calcul de la vraisemblance, à savoir la :

Procédure progressive

Considérons la suite (indexée par n) des vecteurs ligne $\alpha(n)$, définis par :

$$\alpha_y(n) = \mathbb{P}_\theta(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n, Y_n = y), y \in F.$$

Cette suite se calcule par une récurrence "progressive" comme suit :

1. Initialisation :

$$\alpha_y(1) = \mu_y Q_{y x_1}, y \in F.$$

2. Récurrence :

$$\alpha_y(n+1) = (\alpha(n)P)_y Q_{y x_{n+1}}, y \in F.$$

La quantité cherchée est donnée par :

$$\sum_{y \in F} \alpha_y(N).$$

Ce calcul requiert de l'ordre de $d^2 N$ opérations.

On peut aussi calculer la même quantité en utilisant la :

Procédure rétrograde

On introduit les vecteurs colonne $\beta(n)$, définis par :

$$\beta_y(n) = \mathbb{P}_\theta(X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N | Y_n = y), y \in F.$$

Cette suite se calcule par une récurrence "rétrograde" comme suit :

1. Initialisation :

$$\beta_y(N) = 1, \quad y \in F.$$

2. Récurrence :

$$\mathbf{2-a} \quad \tilde{\beta}_y(n) = \beta_y(n)Q_{yx_n}, y \in F.$$

$$\mathbf{2-b} \quad \beta(n-1) = P\tilde{\beta}(n).$$

Finalement la quantité cherchée vaut le scalaire (produit d'un vecteur ligne à gauche par un vecteur colonne à droite) :

$$\mu\tilde{\beta}(1).$$

A nouveau, le nombre d'opérations requises est de l'ordre de d^2N . Notons que

$$\tilde{\beta}_y(n) = \mathbb{P}_\theta(X_n = x_n, X_{n+1} = x_{n+1}, \dots, X_N = x_N | X_n = y), y \in F.$$

4.4.2 L'algorithme de Viterbi

Si l'on admet que le paramètre θ est connu, l'algorithme de Viterbi calcule la suite (y_1^*, \dots, y_N^*) qui maximise la vraisemblance. Définissons la suite de vecteurs ligne $\delta(n)$ par :

$$\delta_y(n) = \max_{y_1, y_2, \dots, y_{n-1}} \mathbb{P}_\theta(Y_1 = y_1, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}, Y_n = y, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n)$$

$\delta_y(n)$ est en quelque sorte la plus forte probabilité d'une trajectoire des $\{Y_k, 1 \leq k \leq n-1\}$, qui se termine par $Y_n = y$, et correspondant à la suite des nucléotides observés x_1, \dots, x_n . On a la formule de récurrence suivante entre les vecteurs $\delta(n)$:

$$\delta_y(n+1) = (\delta(n) * P)_y Q_{yx_{n+1}}$$

où l'opération $*$ qui à un vecteur ligne de dimension d et une matrice $d \times d$ associe un vecteur ligne de dimension d est définie comme suit :

$$(\delta * P)_y = \sup_{z \in F} \delta_z P_{zy}.$$

L'algorithme de Viterbi consiste à calculer les $\delta(n)$ de $n = 1$ à $n = N$, puis à retrouver la trajectoire optimale en cheminant pas à pas dans le sens "rétrograde" : connaissant y_n^* , on en déduit y_{n-1}^* par la formule :

$$y_{n-1}^* = \psi_{y_n^*}(n),$$

avec

$$\psi_y(n) = \operatorname{argmax}_{z \in F} \delta_z(n-1) P_{zy}.$$

L'algorithme de Viterbi est décrit comme suit :

1. *Initialisation* :

$$\begin{aligned} \delta_y(1) &= \mu_y Q_{yx_1}, \quad y \in F; \\ \psi(1) &= 0. \end{aligned}$$

2. *Réurrence* : pour $1 < n \leq N$,

$$\begin{aligned} \delta_y(n) &= (\delta(n-1) * P)_y Q_{yx_n}, \\ \psi_y(n) &= \operatorname{argmax}_{z \in F} \delta_z(n-1) P_{zy}, \quad y \in F. \end{aligned}$$

3. *Etape finale* :

$$\begin{aligned} \delta^* &= \max_{y \in F} \delta_y(N) \\ y_N^* &= \operatorname{argmax}_{y \in F} \delta_y(N). \end{aligned}$$

4. *Réurrence rétrograde*

$$y_n^* = \psi_{y_{n+1}^*}(n+1), \quad 1 \leq n < N.$$

Remarque 4.4.1. Notons que l'algorithme de Viterbi est un exemple d'algorithme de la programmation dynamique. Cet algorithme a été inventé par Richard Bellman en 1950, comme algorithme de calcul d'un contrôle optimal, cf. chapitre 5 ci-dessous.

4.4.3 Estimation des paramètres

Il y a deux stratégies possibles. L'une consiste à estimer les paramètres sur une séquence d'apprentissage déjà annotée. Dans ce cas, on estime les

paramètres d'un modèle où toute la suite $\{(X_n, Y_n), 1 \leq n \leq N\}$ est observée. On utilise les algorithmes d'estimation bien connus que nous avons présentés dans les sections précédentes.

L'autre stratégie consiste à estimer les paramètres sur la base des seules observations de la suite des nucléotides. L'avantage est de faire l'estimation à partir du génome étudié, et non pas à partir d'un génome différent. L'inconvénient est bien sûr que l'on estime un modèle avec des observations très partielles. Il existe cependant des algorithmes maintenant classiques (l'algorithme EM, et sa variante SEM), qui permettent de résoudre ce problème.

Algorithme EM La statistique mathématique nous enseigne qu'un bon estimateur de θ est l'estimateur du maximum de vraisemblance :

$$\hat{\theta}_N = \arg \max_{\theta} \mathbb{P}_{\theta}(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_N = x_N).$$

Pour alléger les écritures, on notera dorénavant

$$O_N = \{X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_N = x_N\},$$

$$Y^N = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N), \quad y^N = (y_1, y_2, \dots, y_N).$$

On ne connaît pas de méthode pour trouver un maximum global de la fonction

$$\theta \rightarrow \mathbb{P}_{\theta}(O_N).$$

On va indiquer un algorithme itératif qui converge vers un maximum local de cette fonction, l'algorithme de Baum–Welch. Remarquons tout d'abord que :

$$\mathbb{P}_{\theta}(O_N) = \frac{\mathbb{P}_{\theta}(Y^N = y^N, O_N)}{\mathbb{P}_{\theta}(Y^N = y^N | O_N)}, \text{ d'où :}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N | O_N) \log \mathbb{P}_{\theta}(O_N) &= \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N | O_N) \log \mathbb{P}_{\theta}(Y^N = y^N, O_N) \\ &\quad - \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N | O_N) \log \mathbb{P}_{\theta}(Y^N = y^N | O_N). \end{aligned}$$

Sommant sur $y^N \in F^N$, on obtient

$$\begin{aligned} \log \mathbb{P}_{\theta}(O_N) &= \frac{1}{\mathbb{P}_{\theta_0}(O_N)} \sum_{y^N} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N, O_N) \log \mathbb{P}_{\theta}(Y^N = y^N, O_N) \\ &\quad - \sum_{y^N} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N | O_N) \log \mathbb{P}_{\theta}(Y^N = y^N | O_N) \end{aligned}$$

d'où, en soustrayant la même identité avec $\theta = \theta_0$:

$$\begin{aligned} & \log \mathbb{P}_\theta(O_N) - \log \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N) \\ &= \frac{1}{\mathbb{P}_{\theta_0}(O_N)} \left[\sum_{y^N} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N, O_N) \log \mathbb{P}_\theta(Y^N = y^N, O_N) \right. \\ & \quad \left. - \sum_{y^N} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N, O_N) \log \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N, O_N) \right] \\ & \quad + \sum_{y^N} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N | O_N) \log \frac{\mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N | O_N)}{\mathbb{P}_\theta(Y^N = y^N | O_N)} \end{aligned}$$

Il résulte de la convexité de la fonction $-\log$ et de l'inégalité de Jensen que le dernier terme de l'identité ci-dessus est non-négatif. On pose :

$$Q(\theta_0, \theta) = \sum_{y^N \in F^N} \mathbb{P}_{\theta_0}(Y^N = y^N, O_N) \log \mathbb{P}_\theta(Y^N = y^N, O_N)$$

Il résulte du calcul ci-dessus que :

$$Q(\theta_0, \theta) \geq Q(\theta_0, \theta_0) \Rightarrow \mathbb{P}_\theta(O_N) \geq \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N).$$

L'algorithme itératif de Baum-Welch consiste, à chaque itération, à calculer θ_{n+1} en fonction de θ_n suivant la formule suivante ;

$$\theta_{n+1} = \arg_\theta \max Q(\theta_n, \theta)$$

Pour garder n comme indice du temps, on va plutôt noter :

$$\bar{\theta} = \arg_\theta \max Q(\theta_0, \theta)$$

Cet algorithme s'interprète en fait comme un algorithme EM adapté à notre problème.

L'algorithme EM est bien connu en statistique. L'étape E (comme espérance) consiste ici en le calcul de la fonction $\theta \rightarrow Q(\theta_0, \theta)$, et l'étape M (comme maximisation) en la recherche du point $\bar{\theta}$ où la fonction atteint son maximum.

Notons que :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_\theta(Y^N = y^N, O_N) &= \mu_{y_1} Q_{y_1 x_1} \prod_{n=1}^N P_{y_{n-1} y_n} Q_{y_n x_n} \\ \log \mathbb{P}_\theta(Y^N = y^N, O_N) &= \log \mu_{y_1} + \sum_{n=2}^N \log P_{y_{n-1} y_n} + \sum_{n=1}^N \log Q_{y_n x_n}\end{aligned}$$

Il est alors facile de voir, avec la notation $\theta = (\mu, P, Q)$, que

$$Q(\theta_0, \theta) = Q_0(\theta_0, \mu) + \sum_{y \in F} Q_1(\theta_0, P_{y \cdot}) + \sum_{y \in F} Q_2(\theta_0, Q_{y \cdot}),$$

avec

$$\begin{aligned}Q_0(\theta_0, \mu) &= \sum_{y \in F} \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_1 = y) \log \mu_y, \\ Q_1(\theta_0, P_{y \cdot}) &= \sum_{n=2}^N \sum_{x \in F} \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_{n-1} = y, Y_n = x) \log P_{yx} \\ Q_2(\theta_0, Q_{y \cdot}) &= \sum_{n=1}^N \sum_{z \in E} \delta_{x_n z} \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_n = y) \log Q_{yz}.\end{aligned}$$

On voit que le problème de la recherche du maximum se décompose en $1+2$ $\text{card}F$ problèmes de recherche d'un maximum, tous de la forme :

$$\arg \max_{0 \leq v_y \leq 1; y \in F, \sum_y v_y = 1} \sum_{y \in F} w_y \log v_y,$$

où les $w_j \in [0, 1]$. On supprime les contraintes $\sum_y v_y = 1$ en exprimant un des v_y en fonction des autres, et l'annulation du gradient conduit à la solution :

$$v_y = \frac{w_y}{\sum_{y' \in F} w_{y'}}.$$

D'où les formules suivantes pour $\bar{\theta} = (\bar{\mu}, \bar{P}, \bar{Q})$:

$$\bar{\mu}_y = \frac{\mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_1 = y)}{\mathbb{P}_{\theta_0}(O_N)} = \mathbb{P}_{\theta_0}(Y_1 = y | O_N), \quad y \in F.$$

$$\bar{P}_{xy} = \frac{\sum_{n=2}^N \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_{n-1} = x, Y_n = y)}{\sum_{n=2}^N \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_{n-1} = x)}, \quad x, y \in F.$$

$$\bar{Q}_{xz} = \frac{\sum_{n=1}^N \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_n = x) \delta_{x_n z}}{\sum_{n=1}^N \mathbb{P}_{\theta_0}(O_N, Y_n = x)}, \quad x \in F, z \in E.$$

où x_n désigne la valeur observée de X_n , et δ le symbole de Kronecker ($\delta_{u'u} = 1$ ou 0, selon que $u' = u$ ou $u' \neq u$). Il reste à voir comment calculer les probabilités qui interviennent ci-dessus. Pour éviter des indices supplémentaires, on notera $\theta_0 = (\mu, P, Q)$. On a :

$$\bar{\mu}_y = \frac{\tilde{\beta}_y(1) \mu_y}{\sum_{y \in F} \tilde{\beta}_y(1) \mu_y}$$

Notons $A = \{X_1 = x_1, \dots, X_{n-1} = y_{n-1}, Y_{n-1} = x\}$, $B = \{Y_n = y, X_n = x_n, \dots, X_N = x_N\}$. On a

$$\mathbb{P}_{\theta_0}(A \cap B) = \mathbb{P}_{\theta_0}(B|A) \mathbb{P}_{\theta_0}(A),$$

$$\mathbb{P}_{\theta_0}(A) = \alpha_x(n-1),$$

et grâce à la propriété de Markov et à l'indépendance conditionnelle des X_k sachant les Y_k ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{\theta_0}(B|A) &= \mathbb{P}_{\theta_0}(B|Y_{n-1} = x) \\ &= \mathbb{P}_{\theta_0}(X_n = x_n, \dots, X_N = x_N | Y_n = y) \mathbb{P}_{\theta_0}(Y_n = y | Y_{n-1} = x) \\ &= P_{xy} \tilde{\beta}_y(n) \end{aligned}$$

Notons, pour le calcul du dénominateur, que $\beta_x(n-1) = \sum_{y \in F} P_{xy} \tilde{\beta}_y(n)$. On déduit des calculs précédents la formule :

$$\bar{P}_{xy} = \frac{\sum_{n=2}^N \alpha_x(n-1) P_{xy} \tilde{\beta}_y(n)}{\sum_{n=2}^N \alpha_x(n-1) \beta_x(n-1)}$$

Enfin, un calcul analogue donne

$$\bar{Q}_{xz} = \frac{\sum_{n=1}^N \alpha_x(n) \beta_x(n) \delta_{x_n z}}{\sum_{n=1}^N \alpha_x(n) \beta_x(n)}$$

Remarques sur l'implémentation Les algorithmes ci-dessus (algorithme de Viterbi et de Baum–Welch) ne sont pas implémentables tels quels sur machine. La raison en est que l'on manipule des produits d'un grand (si N est grand) nombre de termes plus petits que 1, ce qui donne des quantités microscopiques.

L'algorithme de Viterbi ne comportant que des produits et des maxima, la solution est de calculer les logarithmes des quantités qui interviennent (ce qui remplace les produits par des sommes). L'étape finale de recherche de la trajectoire optimale est inchangée, puisque la fonction log est croissante.

L'algorithme de Baum–Welch comporte des sommes, et dans ce cas la solution passe par l'utilisation de constantes de normalisation.

En pratique, on va remplacer les α par les $\hat{\alpha}$ définis par :

$$\hat{\alpha}_x(n) = \left(\sum_{y \in F} \alpha_y(n) \right)^{-1} \alpha_x(n)$$

si l'on note

$$C(n) = \left(\sum_{y \in F} \alpha_y(n) \right)^{-1}, \text{ alors}$$

$$C(n) = c_1 c_2 \times \cdots \times c_n, \text{ où}$$

$$c_n = \left(\sum_{y \in F} (\hat{\alpha}(n-1)P)_y Q_{yx_n} \right)^{-1}.$$

On définit de façon analogue,

$$\hat{\tilde{\beta}}_y(n) = c_n \times c_{n+1} \times \cdots \times c_N \tilde{\beta}_y(n),$$

$$\hat{\beta}_y(n) = c_n c_{n+1} \times \cdots \times c_N \beta_y(n)$$

et on voit aisément comment réécrire \bar{P} et \bar{Q} en fonction des $\hat{\alpha}$ et des $\hat{\beta}$, $\hat{\tilde{\beta}}$, de telle sorte que chaque terme de la somme apparaissant au numérateur, comme au dénominateur, soit multiplié par $C(N)$.

Notons qu'avec ces notations

$$\log \mathbb{P}_\theta(O_N) = -\log C(N) = -\sum_{n=1}^N \log c_n.$$

Algorithme SEM Nous allons enfin présenter de façon très sommaire l'algorithme SEM, qui est le plus utile dans les situations que nous décrirons plus loin. Pour chaque valeur du paramètre inconnu θ , on considère la loi conditionnelle des états cachés, sachant la suite des nucléotides, notée

$$\mathbb{P}_\theta(Y_1 = y_1, \dots, Y_N = y_N | X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N),$$

ou plutôt

$$\mathbb{P}_\theta(Y_1^N = y_1^N | X_1^N = x_1^N).$$

L'algorithme SEM est un algorithme itératif, que l'on initie avec une valeur θ_0 . L'itération qui remplace θ_n par θ_{n+1} se décompose en deux étapes comme suit :

- *Simulation* On tire au hasard une réalisation de la suite aléatoire Y_1^N , suivant la loi $\mathbb{P}_{\theta_n}(Y_1^N = \cdot | X_1^N = x_1^N)$. Notons $y_1^N(n)$ la suite obtenue ainsi.
- *Maximisation* On choisit

$$\theta_{n+1} = \operatorname{argmax}_\theta \mathbb{P}_\theta(Y_1^N = y_1^N(n), X_1^N = x_1^N).$$

Dans l'algorithme EM, l'étape de simulation est remplacée par le calcul de $\mathbb{E}_{\theta_n}(Y_1^N | X_1^N = x_1^N)$.

4.5 Modèle semi-markovien caché

4.5.1 Les limites du modèle de Markov caché

Une conséquence de la propriété de Markov est que les temps de séjour d'une chaîne de Markov dans chacun des états visités suivent des lois géométriques. Le modèle de la section 10 implique donc que les longueurs des plages codantes et non codantes d'un génome prokaryote suivent des lois géométriques. Or cette hypothèse ne cadre pas avec les données dont on dispose. Il y a là un premier argument pour envisager un modèle plus général, mais on va voir maintenant un argument encore plus convainquant pour abandonner le modèle de Markov caché.

Examinons plus précisément notre problème, en nous limitant à nouveau pour simplifier au génome prokaryote. Il est bien sûr essentiel de prendre en compte l'information contenue dans les codons START et STOP. Si l'on renonce à un modèle phasé, on est obligé d'introduire 3 états START, 3

états codants et 3 états STOP, chacun correspondant à une des trois phases de lecture, le tout doit être multiplié par deux pour tenir compte du brin complémentaire. On ajoute un état non codant. Cela fait en tout 19 états. Certes, la plupart des termes de la matrice de transition sont nuls, mais cela fait quand même beaucoup d'états, et dans le cas eukaryote la situation est bien pire. On peut réduire ce nombre avec un modèle phasé, mais on récupère la même complexité en multipliant par trois le nombre de matrices de transition à estimer. Enfin on pourrait penser travailler sur la suite des codons plutôt que sur celle des nucléotides, mais ceci ne serait pas valable pour les parties non codantes.

On va voir ci-dessous que le modèle semi-markovien permet de réduire le nombre d'états à trois dans le cas prokaryote, en outre qu'il permet de choisir une loi plus réaliste que la loi géométrique pour la longueur des plages codantes.

4.5.2 Qu'est-ce qu'une chaîne semi-markovienne ?

La réponse dépend des auteurs. On va donner une définition possible. Comme son nom l'indique, une chaîne semi-markovienne est "un peu moins markovienne" (i.e. oublie un peu moins son passé) qu'une chaîne de Markov. Étant donnée une suite aléatoire (X_1, \dots, X_N) , et $1 < n < N$, on définit pour chaque $1 < n < N$ la v. a. η_n de la façon suivante

$$\eta_n = \sup\{k \geq 0, X_{n-k} = X_{n-k+1} = \dots = X_n\}.$$

Dans l'application qui nous intéresse, c'est le nombre de sites à gauche du site n , qui sont dans la même plage que celui-ci. Bien entendu, si l'on connaît la réalisation de la suite (X_1, \dots, X_n) , on connaît la valeur de η_n . On notera $\varphi_n(x_1, \dots, x_n)$ la valeur de η_n quand $(X_1, \dots, X_n) = (x_1, \dots, x_n)$. C'est à dire

$$\varphi_n(x_1, \dots, x_n) = \sup\{k; x_{n-k} = \dots = x_n\},$$

d'où $\eta_n = \varphi_n(X_1, \dots, X_n)$.

Définition 4.5.1. *Une suite aléatoire (X_1, \dots, X_N) à valeurs dans E est une chaîne semi-markovienne ssi pour tout $1 < n \leq N$, pour tout $(x_1, \dots, x_{n-1}, x, y) \in E^{n+1}$,*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_1 = x_1, \dots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x) \\ &= \mathbb{P}(X_{n+1} = y | X_n = x, \eta_n = \varphi_n(x_1, \dots, x_{n-1}, x)). \end{aligned}$$

Le fait que l'état suivant d'une chaîne semi-markovienne dépende non seulement de l'état courant, mais de la longueur de la "visite" dans cet état jusqu'au site considéré fait que les lois des temps de séjour dans les divers états sont complètement arbitraires.

Plus précisément, une façon "générique" de préciser la loi d'une chaîne semi-markovienne (et aussi d'indiquer comment la simuler) est la suivante.

- D'une part on associe à chaque point $x \in E$ une loi de probabilité $(d_x(n), n \in \mathbb{N} \setminus \{0\})$ sur les entiers privés de 0, qui précise les lois des longueurs des "plages" sur lesquelles la chaîne est constante.
- D'autre part on se donne une matrice de transition P sur $E \times E$ d'une chaîne de Markov, dont tous les termes diagonaux sont nuls. Cette matrice décrit suivant quelle loi la chaîne change d'état, quand elle en change.

Voyons comment simuler une chaîne semi-markovienne dont la loi est caractérisée par les données : pour tout $x \in E$, d_x désigne la loi du temps de séjour à l'état x , et P_x la loi du prochain état visité après l'état x . Si x est le point de départ ($X_1 = x$), on tire une variable aléatoire T_1 à valeurs dans \mathbb{N}^* de loi d_x . Notons n la valeur simulée. Alors $X_1 = X_2 = X_3 = \dots = X_n = x$. On tire une v.a. Z_1 de loi P_x sur $E \setminus \{x\}$. Supposons que le résultat du tirage soit $Z_1 = y$. Alors $X_{n+1} = y$, et on recommence en tirant une v. a. T_2 de loi d_y , et une v.a. Z_2 de loi P_y , et ainsi de suite. Tous les tirages successifs sont bien entendu indépendants les uns des autres.

4.5.3 Le modèle semi-markovien caché

Encore une fois, limitons-nous pour simplifier au cas prokaryote. On considère 3 états cachés, l'état 0 pour *non codant*, l'état 1 pour *codant à l'endroit*, l'état 2 pour *codant à l'envers*. L'état 0 est un état *markovien* (on verra ci-dessous la raison de cette restriction), ce qui veut dire que la loi des longueurs des plages non codantes est une loi géométrique de paramètre q (à estimer). Les états 1 et 2 sont dits *semi-markoviens*. On choisira comme loi des longueurs des plages codantes à l'endroit et à l'envers l'image par l'application $x \rightarrow 3x$ d'une loi binomiale négative de paramètres $m \in \mathbb{N}^*$ et $0 < p < 1$ (i. e. cette loi décrit le nombre de codons plutôt que le nombre de nucléotides).

Définition 4.5.2. *On dit que la v.a. T suit la loi binomiale négative de paramètres m et p si T est le nombre de jets de pile ou face nécessaires pour*

obtenir exactement m piles, p désignant la probabilité d'obtenir pile à chaque coup. Soit

$$\mathbb{P}(T = k) = C_{m-1}^{k-1} (1-p)^{k-m} p^m,$$

qui vaut la probabilité d'obtenir $m-1$ piles au cours des $k-1$ premiers coups, multipliée par la probabilité d'obtenir pile au k -ième coup.

La logique voudrait que l'on choisisse comme valeur du paramètre m le plus petit nombre d'acides aminés que contient un gène, plus deux (pour les codons START + STOP). Malheureusement, ce nombre minimal peut être extrêmement réduit dans des cas tout à fait exceptionnels, alors qu'il est de l'ordre de la dizaine hormis ces cas tout à fait exceptionnels. Un choix raisonnable semble être $m = 10$, mais ce choix doit être critiqué–validé par le Biologiste (et/ou confronté à la séquence étudiée).

Quant au paramètre p , il doit être estimé.

Quant à la loi de probabilité qui régit les changements d'état, elle est définie comme suit. On admet que tout plage codante (à l'endroit comme à l'envers) est suivie d'une plage non codante. Donc $P_{10} = P_{20} = 1$. En outre, $P_{01} + P_{02} = 1$, et on peut soit supposer que $P_{01} = 1/2$, soit chercher à estimer cette quantité.

Discutons maintenant de la loi des nucléotides, sachant l'état caché. On peut admettre que dans les plages non codantes, les nucléotides sont i. i. d., la loi commune étant à estimer. Dans une plage codante, on suppose par exemple que les codons sont mutuellement indépendants, le premier prenant ses valeurs dans l'ensemble des codons START possibles, le dernier dans l'ensemble des codons STOP possibles, les autres codons étant i. i. d., à valeurs dans les codons possibles qui codent pour un acide aminé (en particulier ces codons ne peuvent pas prendre comme valeur un des codons STOP). La description de la loi des codons d'une plage codante à l'envers se déduit aisément de celle que nous venons de donner pour les plages codantes à l'endroit.

4.5.4 Viterbi dans le cas semi-markovien caché

Nous allons maintenant décrire comment l'algorithme de Viterbi s'écrit dans notre nouvelle situation (qui est en fait une situation mixte markov caché – semi-markov caché).

Comme pour les chaînes de Markov cachées, l'idée est de calculer des quantités $\delta_y(n)$, pour tous les états cachés y , et $1 \leq n \leq N$. Pour $y = 0$, on

pose comme précédemment

$$\delta_y(n) = \max_{y_1, y_2, \dots, y_{n-1}} \mathbb{P}_\theta(Y_1 = y_1, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}, Y_n = y, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n).$$

Pour $y = 1$ (et de même pour $y = 2$), on pose

$$\delta_y(n) = \max_{y_1, \dots, y_{n-1}} P_\theta(Y_1 = y_1, \dots, Y_{n-1} = y_{n-1}, Y_n = y, Y_{n+1} \neq y, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n)$$

La formule de récurrence est la suivante :

$$\begin{aligned} \delta_y(n) = \max & \left\{ P_\theta(X_1^n = x_1^n | Y_1^n = y, Y_{n+1} \neq y) d_y(n) \mu_y, \right. \\ & \max_{1 \leq k \leq n-1} \left[P_\theta(X_{n-k+1}^n = x_{n-k+1}^n | Y_{n-k} \neq y, Y_{n-k+1}^n = y, Y_{n+1} \neq y); \right. \\ & \left. \left. \max_{z \neq y} (\delta_z(n-k) P_{zy}) d_y(k) \right] \right\} \end{aligned}$$

Remarquons que le fait qu'à chaque étape on ait à calculer un max sur $1 \leq k \leq n$ rend l'algorithme a priori quadratique en N , ce qui est une mauvaise nouvelle. Cependant on peut limiter la portée de ce max, en arguant du fait qu'une région codante se termine au premier codon STOP rencontré. Cette remarque est encore vraie pour un exon dans le cas eukaryote : celui-ci se termine au plus loin lors de la rencontre du premier codon STOP (soit que ce codon marque effectivement la fin du gène, soit qu'il soit situé dans un intron, ou encore dans la mauvaise phase de lecture, mais au delà du premier intron rencontré). La même remarque ne s'applique pas aux régions non codantes, d'où le choix de prendre l'état 0 markovien.

4.5.5 Recherche de gènes dans un génome prokariote

La loi a priori des Y

On a 3 états, codant $+$ = 1, codant $-$ = 2, non codant = 0.

- La loi de Y_1 est une loi $\mu = (\mu_0, \mu_1, \mu_2)$.
- Quand $Y_n = 0$, on tire Y_{n+1} suivant la loi $p = (p_0, p_1, p_2)$ (avec $p_0 > 0$, $p_1 > 0$, $p_2 > 0$, $p_0 + p_1 + p_2 = 1$).
- Si $Y_{n-1} = 0$ et $Y_n = 1$ (description analogue en remplaçant 1 par 2), on tire la longueur de la région codante suivant une loi qui ne charge que les multiples entiers de 3. Juste après une plage codante, on est dans l'état non codant (état 0).

La loi conditionnelle des X , sachant les Y

- Sachant que $Y_n = 0$, X_n est indépendant de tout le reste, et suit la loi $q = (q_a, q_c, q_g, q_t)$ (avec $q_a > 0$, $q_c > 0$, $q_g > 0$ et $q_t > 0$, $q_a + q_c + q_g + q_t = 1$).
- Si $Y_n = 1$ (description analogue si $Y_n = 2$), tout dépend de où on en est dans la plage codante
 1. Le 1er codon suit une loi à déterminer portée par les codons START.
 2. Les codons intermédiaires sont tirés suivant une loi qui charge les divers codons qui codent pour des Acides Aminés, les codons STOP possibles étant exclus.
 3. Le dernier codon est tiré suivant une loi à déterminer portée par les codons STOP.

Le calcul des δ

Pour $y = 1$ et $y = 2$, on définit

$$\delta_y(n) = \max_{y_1, \dots, y_{n-1}} \mathbb{P}(Y_1^{n-1} = y_1^{n-1}, Y_n = y, Y_{n+1} = 0, X_n^1 = x_n^1).$$

Pour $y = 0$, on définit

$$\delta_0(n) = \max_{y_1, \dots, y_{n-1}} \mathbb{P}(Y_1^{n-1} = y_1^{n-1}, Y_n = 0, X_n^1 = x_n^1).$$

- Pour $n < 3m$, $\delta_1(n) = \delta_2(n) = 0$. En outre si $Y_n = 0$, nécessairement toute la suite Y_1, \dots, Y_n est constante et égale à 0. Donc il n'y a pas de maximum à prendre et

$$\delta_0(n) = \mathbb{P}(Y_1^n = 0, X_1^n = x_1^n) = \mu_0 p_0^{n-1} \prod_{k=1}^n q_{x_k}.$$

- Pour $n \geq 3m$,
 - Voyons d'abord la formule de récurrence dans le cas $y = 0$. Si $n > 3m$, la collection des y_1, \dots, y_{n-1} sur laquelle on prend le maximum se subdivise en trois classes, suivant la valeur de y_{n-1} . On a

$$\delta_0(n) = \max[\delta_0(n-1)p_0, \delta_1(n-1), \delta_2(n-1)]q_{x_n}.$$

– Considérons maintenant le cas $y = 1$ (on traiterait de la même façon le cas $y = 2$).

1. soit $Y_1^n = 1$ et $Y_{n+1} \neq 1$ (ce qui suppose que n est un multiple entier de 3). Cela s'écrit :

$$\mathbb{P}(X_1^n = x_1^n \mid Y_1^n = 1, Y_{n+1} \neq 1) d_1(n) \mu_1$$

2. soit la séquence cachée est en 1 sur la plage $[n - k + 1, n]$, alors (avec $y_{n-k} \neq 1$, donc nécessairement $y_{n-k} = 0$, ce qui impose que k soit un multiple entier de 3; et la quantité qui suit est nulle sauf si à la fois $(x_{n-k}, x_{n-k+1}, x_{n-k+2})$ est un codon START et (x_{n-2}, x_{n-1}, x_n) est un codon STOP)

$$\max_{y_1, \dots, y_{n-k-1}} \mathbb{P}(Y_1^{n-k} = y_1^{n-k}, Y_{n-k+1}^n = 1, Y_{n+1} = 0, X_1^n = x_1^n)$$

$$= \delta_0(n - k) p_1$$

$$\times \mathbb{P}(X_{n-k+1}^n = x_{n-k+1}^n, Y_{n-k+1}^n = 1, Y_{n+1} = 0 \mid Y_{n-k+1} = 1, Y_{n-k} = 0)$$

$$= \delta_0(n - k) p_1$$

$$\times \mathbb{P}(X_{n-k+1}^n = x_{n-k+1}^n \mid Y_{n-k} = 0, Y_{n-k+1}^n = 1, Y_{n+1} = 0) d_1(k).$$

La probabilité conditionnelle ci-dessus se factorise en

$$\prod_{j=0}^{k/3} \mathbb{P}(X_{n-k+3j+1}^{n-k+3j+3} = x_{n-k+3j+1}^{n-k+3j+3} \mid Y_{n-k} = 0, Y_{n-k+1}^n = 1, Y_{n+1} \neq 1)$$

$$= \mathbb{P}_{\text{START}}(x_{n-k+1}^{n-k+3}) \prod_{j=1}^{k/3-1} \mathbb{P}_{\text{CODANT}}(x_{n-k+3j+1}^{n-k+3j+3}) \mathbb{P}_{\text{STOP}}(x_{n-2}^n)$$

$$:= \mathbb{P}_{\text{C}+}(x_{n-k+1}^n).$$

Finalement, avec la convention $\delta_0(0) = \mu_1/p_1$,

$$\delta_1(n) = \max_{k \text{ multiple entier de } 3; 3m \leq k \leq n} \delta_0(n-k) p_1 \mathbb{P}_{\text{C}+}(x_{n-k+1}^n) d_1(k).$$

4.6 Alignement de deux séquences

Considérons deux séquences de nucléotides (ou d'acides aminés)

$$\begin{aligned}x_1^n &= (x_1, \dots, x_n) \\ y_1^m &= (y_1, \dots, y_m).\end{aligned}$$

Considérons pour fixer les idées le cas de séquences de nucléotides. Soit les deux séquences

```
a a c g g t t c c c a g t t
a c g t t t c c a g t c.
```

On a bien envie de les aligner comme suit

```
a a c g g t t c c c a g t t
a - c g t t t c c - a g t c.
```

Pour faire cela, on crée des *trous* (*gap* en Anglais) (dans l'une des deux séquences (on aurait pu vouloir créer des *trous* dans chacune des deux séquences)). Notons que du moment que $n \neq m$, on aura un minimum de $|n - m|$ *trous*.

On peut associer à chaque alignement des deux séquences x_1^n et y_1^m un *score*, qui sera d'autant plus élevé que l'alignement est *bon*. Supposons que la longueur commune des séquences alignées (en comptant les *trous*) est T . Nécessairement, $T \geq \sup(n, m)$. Pour $1 \leq i \leq T$, si en position i on trouve le nucléotide a_i dans la première séquence et le nucléotide b_i dans la seconde séquence (on n'a pas nécessairement $a_i = x_i$, sauf s'il n'y a pas de *trou* dans la première séquence à gauche de la position i ; idem pour la seconde séquence), la position i contribue $s(a_i, b_i)$ au score global de l'alignement. Si à la position i on a l'ouverture d'un *trou* dans l'une des deux séquences (au sens où il y a un trou dans la première (resp. la seconde) séquence à la position i , et pas de trou dans la même séquence à la position $i - 1$), cette position contribue $-d$ au score global, et si on a le prolongement d'un *trou*, i contribue $-e$ au score global. Finalement, le score global d'un alignement de longueur T vaut

$$\sum_{1 \leq i \leq T, \text{ pas de trou en } i} s(a_i, b_i) - \sum_{\text{trous 1ère séquence}} (d + (\ell_j - 1)e) - \sum_{\text{trous 2ème séquence}} (d + (\ell'_k - 1)e),$$

si ℓ_j (resp. ℓ'_k) désigne la longueur du j -ième *trou* de la première séquence (resp. du k -ième *trou* de la seconde séquence). s est une application de

$\{\text{acgt}\}^2$ dans \mathbb{R} , qui est maximale sur la diagonale. Dans le cas de séquences d'acides aminés, on remplace bien sûr $\{\text{acgt}\}$ par l'ensemble des 20 acides aminés. Dans les deux cas, s sera choisi de telle sorte que, pour $a \neq b$, $s(a, b)$ sera d'autant plus grand qu'une mutation entre a et b est plus probable.

4.6.1 Algorithme de Needleman–Wunsch

La recherche de l'alignement optimal peut se faire à l'aide d'un algorithme de programmation dynamique. Si l'on définit $M(i, j)$ comme le meilleur score possible parmi tous les débuts d'alignements qui aboutissent à aligner x_i et y_j , $I_x(i, j)$ le meilleur score parmi tous les débuts d'alignements qui aboutissent à aligner x_i avec un *trou* dans la seconde séquence, y_j étant le dernier nucléotide de la seconde séquence à gauche du *trou*, et $I_y(i, j)$ le meilleur score parmi tous les débuts d'alignements qui aboutissent à aligner y_j avec un *trou* dans la première séquence, x_i étant le dernier nucléotide de la première séquence à gauche du *trou*, alors on a les formules de récurrence suivantes :

$$\begin{aligned} M(i, j) &= \max \begin{cases} M(i-1, j-1) + s(x_i, y_j), \\ I_x(i-1, j-1) + s(x_i, y_j), \\ I_y(i-1, j-1) + s(x_i, y_j); \end{cases} \\ I_x(i, j) &= \max \begin{cases} M(i-1, j) - d, \\ I_x(i-1, j) - e; \end{cases} \\ I_y(i, j) &= \max \begin{cases} M(i, j-1) - d, \\ I_y(i, j-1) - e. \end{cases} \end{aligned}$$

On a exclu dans ces formules qu'un trou dans une séquence puisse être immédiatement suivi par un trou dans l'autre, ce qui est vrai pour l'alignement optimal si $-d - e < \inf_{a,b} s(a, b)$. Dans le cas $e = d$, la triple récurrence ci-dessus se réduit à l'unique récurrence

$$F(i, j) = \max \begin{cases} F(i-1, j-1) + s(x_i, y_j), \\ F(i-1, j) - d, \\ F(i, j-1) - d. \end{cases}$$

Il existe de nombreuses variantes de cet algorithme. En particulier, on peut s'intéresser à la recherche du meilleur alignement local (et non nécessairement

global). Celui-ci s'obtient dans le cas $d = e$ en modifiant la récurrence comme suit

$$F(i, j) = \max \begin{cases} 0, \\ F(i-1, j-1) + s(x_i, y_j), \\ F(i-1, j) - d, \\ F(i, j-1) - d. \end{cases}$$

Le fait que le maximum soit atteint par 0 indique le début d'un alignement local. Notons que dans ce cas, $F(\cdot, 0) = F(0, \cdot) \equiv 0$. L'algorithme d'alignement local que nous venons de décrire s'appelle l'algorithme de Smith–Waterman.

4.6.2 Alignement par chaîne de Markov cachée

Nous allons maintenant replacer la recherche d'un alignement optimal entre deux séquences dans le cadre des chaînes de Markov cachées. Ici la chaîne cachée sera notée Z_1, \dots, Z_T . Notons que T n'est pas donné a priori, il est aléatoire. Cette chaîne prend ses valeurs dans un espace à quatre états, que l'on désignera par $\{A, I, S, F\}$, A pour *aligner*, I pour *insérer un trou* dans la première séquence, S pour *supprimer*, soit insérer un trou dans la seconde séquence, F pour *fin* qui est un état absorbant de la chaîne.

Il faut maintenant préciser d'une part la loi a priori de la chaîne Z_1, \dots, Z_T , et d'autre part la loi conditionnelle de la double suite

$$\left(\begin{pmatrix} \hat{X}_1 \\ \hat{Y}_1 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \hat{X}_{T-1} \\ \hat{Y}_{T-1} \end{pmatrix} \right)$$

à valeurs dans l'ensemble $\{\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{t}, -\}$, sachant la suite Z_1, \dots, Z_T (la valeur de T , la longueur de la suite, faisant partie des inconnues qui sont précisées par l'alignement).

On va considérer $\{Z_t, t \geq 1\}$ comme une chaîne de Markov à valeurs dans l'espace $\{A, I, S, F\}$, et $T := \inf\{t \geq 1, Z_t = F\}$. La matrice de transition de cette chaîne est la matrice

$$\begin{pmatrix} 1 - 2\delta - \tau & \delta & \delta & \tau \\ 1 - \varepsilon - \tau & \varepsilon & 0 & \tau \\ 1 - \varepsilon - \tau & 0 & \varepsilon & \tau \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

On choisit comme loi de Z_1 la probabilité

$$(1 - \tau)^{-1}(1 - 2\delta - \tau \quad \delta \quad \delta \quad 0).$$

La loi de (Z_1, \dots, Z_T) est complètement spécifiée.

Notons que la loi de T est donnée par

$$\mathbb{P}(T = t) = (1 - \tau)^{t-2}\tau, \quad t \geq 2.$$

On peut préciser la loi des transitions, conditionnées au fait qu'elles n'aboutissent pas en F . Si l'on pose

$$P_{GH} := \mathbb{P}(Z_{t+1} = H | Z_t = G, T > t + 1),$$

$G, H \in \{A, I, S\}$, on a

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1-2\delta-\tau}{1-\tau} & \frac{\delta}{1-\tau} & \frac{\delta}{1-\tau} \\ \frac{1-\varepsilon-\tau}{1-\tau} & \frac{\varepsilon}{1-\tau} & 0 \\ \frac{1-\varepsilon-\tau}{1-\tau} & 0 & \frac{\varepsilon}{1-\tau} \end{pmatrix}.$$

Précisons maintenant la loi conditionnelle de la suite des \hat{X} et des \hat{Y} , sachant (Z_1, \dots, Z_T) . A nouveau, on écrit les choses dans le cas de séquences de nucléotides. La transposition aux séquences d'acides aminés ne pose pas de difficulté. On se donne d'une part une probabilité $\{p_{a,b}, (a,b) \in \{\text{acgt}\}^2\}$, et d'autre part une probabilité $\{q_a, a \in \{\text{acgt}\}\}$. Conditionnellement en (Z_1, \dots, Z_T) , les v. a. (\hat{X}_t, \hat{Y}_t) , $1 \leq t < T$ sont indépendantes. Sachant que $1 \leq t < T$ et $Z_t = A$, (\hat{X}_t, \hat{Y}_t) est distribué suivant la loi p . Sachant que $1 \leq t < T$ et $Z_t = I$, $\hat{X}_t = -$ et \hat{Y}_t suit la loi q . Sachant que $1 \leq t < T$ et $Z_t = S$, \hat{X}_t suit la loi q et $\hat{Y}_t = -$. (\hat{X}_t, \hat{Y}_t) n'est pas défini pour $t \geq T$. Autrement dit,

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(\left(\begin{array}{c} \hat{X}_1^{T-1} \\ \hat{Y}_1^{T-1} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} x_1^{t-1} \\ y_1^{t-1} \end{array} \right) \middle| Z_1^T = z_1^t \right) &= \prod_{1 \leq i < t; z_i = A} p_{x_i y_i} \prod_{1 \leq j < t; z_j = I} \mathbf{1}_{\{x_j = -\}} q_{y_j} \\ &\times \prod_{1 \leq k < t; z_k = S} q_{x_k} \mathbf{1}_{\{y_k = -\}} \end{aligned}$$

On peut maintenant calculer la probabilité

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P} \left(\left(\begin{array}{c} \hat{X}_1^{T-1} \\ \hat{Y}_1^{T-1} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} x_1^{t-1} \\ y_1^{t-1} \end{array} \right), Z_1^T = z_1^t \right) \\
&= \mu_{z_1} (1 - \tau)^{t-2} \tau \prod_{1 \leq i \leq n, x_i \neq -, y_i \neq -} p_{x_i y_i} \prod_{1 \leq j \leq n, x_j = -} q_{y_j} \prod_{1 \leq k \leq n, y_k = -} q_{x_k} \\
&\quad \times \left(\frac{1 - 2\delta - \tau}{1 - \tau} \right)^{\ell_1} \left(\frac{\delta}{1 - \tau} \right)^{\ell_2} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \tau} \right)^{\ell_3} \left(\frac{1 - \varepsilon - \tau}{1 - \tau} \right)^{\ell_4} \\
&= \mu_{z_1} \tau \prod_{1 \leq i \leq n, x_i \neq -, y_i \neq -} p_{x_i y_i} \prod_{1 \leq j \leq n, x_j = -} q_{y_j} \prod_{1 \leq k \leq n, y_k = -} q_{x_k} \\
&\quad \times (1 - 2\delta - \tau)^{\ell_1} \delta^{\ell_2} \varepsilon^{\ell_3} (1 - \varepsilon - \tau)^{\ell_4},
\end{aligned}$$

où ℓ_1 est le nombre de transitions de la chaîne $\{Z.\}$ de A vers A , ℓ_2 le nombre de transitions de A vers I ou S (ouverture d'un trou), ℓ_3 le nombre de transitions de I ou S vers lui-même (prolongement d'un trou), et ℓ_4 le nombre de transition de I ou S vers A (fermeture d'un trou).

Notons que l'observation est constituée des réalisations des deux suites (X_1, \dots, X_N) et (Y_1, \dots, Y_M) obtenues à partir de la double suite

$$\left(\left(\begin{array}{c} \hat{X}_1 \\ \hat{Y}_1 \end{array} \right), \dots, \left(\begin{array}{c} \hat{X}_{T-1} \\ \hat{Y}_{T-1} \end{array} \right) \right),$$

en supprimant les *trous*.

Il nous faut encore préciser la quantité

$$\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t).$$

En fait on va plutôt calculer la quantité suivante, donc la maximisation par rapport à z_1^t produira le même résultat :

$$\mathbb{P}^*(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t) \frac{\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t)}{\prod_{i=1}^n q_{x_i} \prod_{j=1}^m q_{y_j}}.$$

On a

$$\mathbb{P}^*(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t) = \frac{\tau}{1 - \tau} \prod_{i=1}^{t-1} v(i),$$

avec

$$v(i) = \begin{cases} (1 - 2\delta - \tau) \frac{p_{x_{k(i)} y_{\ell(i)}}}{q_{x_{k(i)}} q_{y_{\ell(i)}}}, & \text{si } z_i = A \text{ et } i = 1 \text{ ou } z_{i-1} = A, \\ (1 - \varepsilon - \tau) \frac{p_{x_{k(i)} y_{\ell(i)}}}{q_{x_{k(i)}} q_{y_{\ell(i)}}}, & \text{si } z_i = A, i > 1 \text{ et } z_{i-1} = I \text{ ou } S, \\ \delta \frac{q_{y_{\ell(i)}}}{q_{y_{\ell(i)}}} = \delta, & \text{si } z_i = I, \text{ et } i = 1 \text{ ou } z_{i-1} = A, \\ \delta \frac{q_{x_{k(i)}}}{q_{x_{k(i)}}} = \delta, & \text{si } z_i = S, \text{ et } i = 1 \text{ ou } z_{i-1} = A, \\ \varepsilon \frac{q_{y_{\ell(i)}}}{q_{y_{\ell(i)}}} = \varepsilon, & \text{si } z_i = I, i > 1 \text{ ou } z_{i-1} = I, \\ \varepsilon \frac{q_{x_{k(i)}}}{q_{x_{k(i)}}} = \varepsilon, & \text{si } z_i = S, i > 1 \text{ ou } z_{i-1} = S, \end{cases}$$

où

$$k(i) = i + \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{1}_{\{z_j=I\}}, \quad \ell(i) = i + \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{1}_{\{z_j=S\}}.$$

On note que $\prod_{i=1}^{t-1} v(i) = \prod_{i=1}^t v'(i)$, où

$$v'(i) = \begin{cases} (1 - 2\delta - \tau) \frac{p_{x_{k(i)} y_{\ell(i)}}}{q_{x_{k(i)}} q_{y_{\ell(i)}}}, & \text{si } z_i = A, \\ \delta \frac{1 - \varepsilon - \tau}{1 - 2\delta - \tau}, & \text{si } z_i = I, \text{ et } i = 1 \text{ ou } z_{i-1} = A, \\ \delta \frac{1 - \varepsilon - \tau}{1 - 2\delta - \tau}, & \text{si } z_i = S, \text{ et } i = 1 \text{ ou } z_{i-1} = A, \\ \varepsilon, & \text{si } z_i = I, i > 1 \text{ ou } z_{i-1} = I, \\ \varepsilon, & \text{si } z_i = S, i > 1 \text{ ou } z_{i-1} = S, \end{cases}$$

pour $1 \leq i < t$, et

$$v'(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } z_{t-1} = A, \\ \frac{1 - \varepsilon - \tau}{1 - 2\delta - \tau}, & \text{si } z_{t-1} = I \text{ ou } S. \end{cases}$$

Chercher un $(z^*)_1^t$ qui maximise $\mathbb{P}^*(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t)$ est équivalent à chercher un $(z^*)_1^t$ qui maximise

$$\log \mathbb{P}^*(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t) \log \left(\frac{\tau}{1 - \tau} \right) + \sum_{i=1}^t \log v'(i).$$

Il est alors facile de voir que l'algorithme de Viterbi pour résoudre ce problème

est exactement l'algorithme de Needleman–Wunsch, à condition de poser

$$\begin{aligned} s(a, b) &= \log \frac{p_{ab}}{q_a q_b} + \log(1 - 2\delta - \tau), \\ d &= -\log \frac{\delta(1 - \varepsilon - \tau)}{1 - 2\delta - \tau}, \\ e &= -\log \varepsilon. \end{aligned}$$

Notons que l'algorithme calcule une trajectoire z_1^t qui maximise la probabilité a posteriori. En particulier, la valeur t de la longueur de l'alignement optimal est donnée par

$$t = \inf\{s, k(s-1) = n, \ell(s-1) = m\}.$$

4.6.3 Loi a posteriori de l'alignement

Nous venons de donner un cadre probabiliste à l'algorithme de Needleman–Wunsch. Nous allons maintenant exploiter ce cadre probabiliste, pour faire des choses nouvelles.

L'idée de chercher à aligner deux séquences est liée à la croyance qu'il y a une similitude entre ces deux séquences, par exemple parce qu'elles dérivent d'une même séquence ancestrale. Lorsqu'un alignement n'est pas performant, cela peut provenir de ce que cet alignement n'est pas le bon, ou qu'il n'y en a pas de bon, par exemple parce que ces séquences n'ont rien à voir entre elles. Il peut être intéressant de disposer d'un critère qui permette de décider dans quelle mesure deux séquences x_1^n et y_1^m sont *alignables*. Un tel critère (d'*alignabilité* ?) est donné par la probabilité que notre modèle de chaîne de Markov cachée produise la paire de séquences observée, i. e. par la quantité

$$\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m) = \sum_{z_1^t \in \text{alignements}} \mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t).$$

Quel est l'ensemble des alignements que parcourt z_1^t ? C'est l'ensemble des suites de longueur arbitraire t , dont les $t-1$ premiers termes appartiennent à l'ensemble $\{A, I, S\}$, et le dernier terme est un F . Evidemment, pour que la probabilité correspondante soit non nulle, une contrainte très forte liant z_1^t à n et m doit être satisfaite, à savoir

$$t = \inf\{s, k(s-1) = n, \ell(s-1) = m\}.$$

En particulier, on doit avoir $t \geq \sup(n, m) + 1$.

On va maintenant voir qu'il existe un algorithme *progressif* qui calcule la quantité $\mathbb{P}(x_1^n, y_1^m)$. Il s'agit tout simplement de la partie progressive de l'algorithme de Viterbi–Needelman–Wunsch, où l'on remplace la maximisation par la somme. Plus précisément, on calcule $(f^A(i, j), f^I(i, j), f^S(i, j))$ par une **récurrence progressive** sur (i, j) comme suit

$$\begin{aligned} f(i, -1) &= f(-1, j) = 0, \quad \forall i, j \\ f^A(0, 0) &= 1, \quad f^I(0, 0) = 0, \quad f^S(0, 0) = 0 \\ f^A(i, j) &= p_{x_i y_j} [(1 - 2\delta - \tau) f^A(i-1, j-1) \\ &\quad + (1 - \varepsilon - \tau)(f^I(i-1, j-1) + f^S(i-1, j-1))] \\ f^I(i, j) &= q_{y_j} [\delta f^A(i, j-1) + \varepsilon f^I(i, j-1)] \\ f^S(i, j) &= q_{x_i} [\delta f^A(i-1, j) + \varepsilon f^I(i-1, j)] \end{aligned}$$

Finalement

$$\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m) = \tau [f^A(n, m) + f^I(n, m) + f^S(n, m)].$$

On peut maintenant considérer la loi a posteriori de l'alignement, i. e. la probabilité conditionnelle

$$\mathbb{P}(Z_1^T = z_1^t | X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m) = \frac{\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t)}{\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m)}.$$

Le cas le plus favorable est celui où cette loi est très concentrée autour de l'alignement optimal, i.e. où la quantité $\mathbb{P}(Z_1^T = (z^*)_1^t | X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m)$ est sinon proche de 1, du moins nettement non nulle. Lorsque ce n'est pas le cas, il peut être intéressant de savoir si l'ensemble des alignements *proches de l'alignement optimal* concentre ou non une masse significative de la loi a posteriori. La loi a posteriori contient donc beaucoup d'information sur la qualité et la pertinence de l'alignement optimal. Nous allons maintenant décrire un algorithme *rétrograde* pour simuler suivant cette loi a posteriori, qui utilise le calcul des quantités $(f^A(i, j), f^I(i, j), f^S(i, j))$ fait ci dessus.

On commence par tirer au hasard avec la probabilité

$$(f^A(n, m) + f^I(n, m) + f^S(n, m))^{-1} (f^A(n, m) \quad f^I(n, m) \quad f^S(n, m))$$

si l'alignement se termine au site $t-1$ par l'alignement de x_n avec y_m (choix de A), ou par l'alignement de y_m avec un *trou* dans la première séquence (choix

de I), ou par l'alignement de x_n avec un trou dans la seconde séquence (choix de S).

Décrivons maintenant l'itération de cet algorithme. Supposons qu'à un moment donné l'algorithme nous ait conduit à aligner x_i et y_j . On examine alors la quantité

$$f^A(i, j) = p_{x_i y_j} [(1 - 2\delta - \tau) f^A(i - 1, j - 1) \quad (4.1)$$

$$+ (1 - \varepsilon - \tau)(f^I(i - 1, j - 1) + f^S(i - 1, j - 1))]. \quad (4.2)$$

On décide alors

- d'aligner x_{i-1} avec y_{j-1} avec la probabilité $\frac{p_{x_i y_j} (1 - 2\delta - \tau) f^A(i - 1, j - 1)}{f^A(i, j)}$,
- d'aligner y_{j-1} avec un *trou* dans la première séquence avec la probabilité $\frac{p_{x_i y_j} (1 - \varepsilon - \tau) f^I(i - 1, j - 1)}{f^A(i, j)}$,
- d'aligner x_{i-1} avec un *trou* dans la seconde séquence avec la probabilité $\frac{p_{x_i y_j} (1 - \varepsilon - \tau) f^S(i - 1, j - 1)}{f^A(i, j)}$.

Si par contre l'algorithme nous avait conduit à aligner y_j avec un *trou* dans la première séquence, x_i étant le dernier nucléotide de celle-ci *non encore utilisé*, on décide

- d'aligner x_i avec y_{j-1} avec la probabilité $\frac{q_{y_j} \delta f^A(i, j - 1)}{f^I(i, j)}$,
- d'aligner y_{j-1} avec un *trou* dans la première séquence avec la probabilité $\frac{q_{y_j} \varepsilon f^I(i, j - 1)}{f^I(i, j)}$.

On a une description analogue dans le cas où x_i est aligné avec un *trou* dans la seconde séquence.

4.6.4 Probabilité a posteriori d'un alignement

Si la probabilité de n'importe quel alignement est faible, il se peut que celle de certains alignements partiels soit élevée. On va voir que l'on peut calculer la probabilité que l'alignement mette en correspondance certaines paires (x_i, y_j) . On notera $x_i \diamond y_j$ l'ensemble des alignements z_1^t qui placent x_i en face de y_j . On va maintenant calculer la probabilité

$$\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, x_i \diamond y_j) = \sum_{z_1^t \in x_i \diamond y_j} \mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, Z_1^T = z_1^t).$$

On a en fait

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, x_i \diamond y_j) &= \mathbb{P}(X_1^i = x_1^i, Y_1^j = y_1^j, x_i \diamond y_j) \\ &\quad \times \mathbb{P}(X_i^N = x_i^n, Y_j^M = y_j^m | x_i \diamond y_j). \end{aligned}$$

Le premier facteur dans cette formule n'est autre que la quantité $f^A(i, j)$ que l'on a calculée par un algorithme progressif à la sous-section précédente.

Le second facteur est la quantité $b^A(i, j)$, que l'on calcule par une **récur-
rence rétrograde** comme suit.

$$\begin{aligned} b^A(n, m) &= b^I(n, m) = b^S(n, m); \\ b(\cdot, m+1) &\equiv b(n+1, \cdot) \equiv 0. \end{aligned}$$

Pour tous les $(i, j) \neq (n, m)$,

$$\begin{aligned} b^A(i, j) &= (1 - 2\delta - \tau)p_{x_{i+1}y_{j+1}} b^A(i+1, j+1) \\ &\quad + \delta[q_{x_{i+1}} b^S(i+1, j) + q_{y_{j+1}} b^I(i, j+1)], \\ b^I(i, j) &= (1 - \varepsilon - \tau)p_{x_{i+1}y_{j+1}} b^A(i+1, j+1) + \varepsilon q_{y_{j+1}} b^I(i, j+1), \\ b^S(i, j) &= (1 - \varepsilon - \tau)p_{x_{i+1}y_{j+1}} b^A(i+1, j+1) + \varepsilon q_{x_{i+1}} b^S(i+1, j). \end{aligned}$$

On notera alors

$$\mathbb{P}(x_i \diamond y_j | X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m) = \frac{\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m, x_i \diamond y_j)}{\mathbb{P}(X_1^N = x_1^n, Y_1^M = y_1^m)},$$

que l'on écrira en abrégé $\mathbb{P}(x_i \diamond y_j)$.

Etant données deux séquences x_1^n et y_1^m , et un alignement z_1^t de ces séquences, on notera $(i, j) \in z_1^t$ si et seulement si $z_1^t \in x_i \diamond y_j$, i. e. si l'alignement z_1^t place x_i et y_j l'un en face de l'autre. La quantité suivante est une sorte d'espérance, pour deux suites x_1^n et y_1^m données, du recouvrement entre l'alignement z_1^t et un alignement tiré au hasard suivant la loi a posteriori des alignements :

$$\mathcal{A}_{x_1^n, y_1^m}(z_1^t) = \sum_{(i,j) \in z_1^t} \mathbb{P}(x_i \diamond y_j).$$

Il s'agit d'un nouveau critère de qualité d'un alignement, pour lequel on peut calculer l'alignement optimal, par l'algorithme de programmation dynamique classique associé à la récurrence progressive (on abandonne ci-dessous l'indice (x_1^n, y_1^m)).

$$A(i, j) = \max \begin{cases} A(i-1, j-1) + \mathbb{P}(x_i \diamond y_j), \\ A(i-1, j), \\ A(i, j-1). \end{cases}$$

Notons que tous les $\mathbb{P}(x_i \diamond y_j)$ se déduisent immédiatement des quantités calculées par les deux algorithmes progressif et rétrograde ci-dessus.

4.7 Un algorithme d'alignement multiple

En bioinformatique, on a souvent besoin d'aligner plus de deux séquences. Ce problème est très difficile. Tous les algorithmes qui résolvent ce problème en un temps raisonnable (c'est à dire tous ceux qui sont utilisés en pratique) procèdent peu ou prou par alignements deux à deux successifs.

Nous allons présenter Probcons, un des dernier né de ces algorithmes, qui est celui qui à ce jour semble donner les meilleurs résultats en terme de précision, tout en étant plus rapide que certains de ses concurrents, cf. [14]. Cet algorithme utilise, comme on va le voir, le cadre des "PairHMMs" que nous venons d'étudier à la section précédente. On reprendra les notations introduites ci-dessus sans les redéfinir. Cependant, nous allons introduire un changement de notation : dorénavant les alignements seront notés a , et non plus z . En effet, puisque nous serons obligés de désigner trois séquences à la fois, nous les noterons $x_1^{|x|}$, $y_1^{|y|}$ et $z_1^{|z|}$.

Etant donné m séquences $\{s^1, \dots, s^m\}$, l'algorithme effectue les opérations successives suivantes :

- Etape 1 : Calcul des matrices de probabilités a posteriori.
Pour chaque paire $x, y \in S$, on calcule la matrice

$$P(x, y) = (P_{ij}(x, y)), \quad 1 \leq i \leq |x|, 1 \leq j \leq |y|$$

donnée par

$$P_{ij}(x, y) = \mathbb{P}(x_i \diamond y_j | X_1^N = x_1^{|x|}, Y_1^M = y_1^{|y|}).$$

- Etape 2 : Alignements deux à deux.
Pour chaque paire $x, y \in S$, on calcule l'alignement a^* qui maximise la quantité

$$\mathcal{A}_{x_1^{|x|}, y_1^{|y|}}(a),$$

et on pose

$$E(x, y) = \frac{1}{\min(|x|, |y|)} \mathcal{A}_{x_1^{|x|}, y_1^{|y|}}(a^*).$$

- Etape 3 : Transformation par consistance.

Aux trois séquences $x, y, z \in S$, on associe en particulier la matrice $|x| \times |z|$ $P(x, z)$ et la matrice $|z| \times |y|$ $P(z, y)$. On a alors bien sûr pour $1 \leq i \leq |x|$ et $1 \leq j \leq |y|$,

$$(P(x, z)P(z, y))_{ij} = \sum_{k=1}^{|z|} P_{ik}(x, z)P_{kj}(z, y),$$

et on définit une nouvelle matrice $P'(x, y)$ par

$$P'(x, y) = \frac{1}{|S|} \sum_{z \in S} P(x, z)P(z, y).$$

Notons que par définition

$$P_{ij}(x, x) = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j, \\ 0, & \text{si } i \neq j. \end{cases}$$

Dans chacune des matrices ci-dessus, un grand nombre de termes sont très petits. Tous les termes inférieurs à un seuil fixé sont mis à zéro, et un algorithme de multiplication de matrices creuses est utilisé. La transformation $P \rightarrow P'$ peut être itérée un nombre arbitraire de fois. Par défaut, ProbCons l'effectue deux fois.

- Etape 4 : Construction d'un arbre.

Ici on va utiliser les quantités $E(x, y)$ calculées à l'étape 2. La construction est effectuée par la méthode itérative suivante. Pour commencer, chaque séquence est identifiée à un groupe. A chaque paire de groupes x et y , on associe la quantité $E(x, y)$ calculée à l'étape 2. A chaque étape, on cherche le couple de groupes (x, y) qui maximise la quantité $E(x, y)$. On fusionne ces deux groupes en un seul noté xy , et on définit pour tout autre groupe z la quantité

$$E(xy, z) := E(x, y) \frac{E(x, z) + E(y, z)}{2}.$$

- Etape 5 : Alignement progressif.

On aligne les séquences deux par deux, en utilisant l'algorithme de Needleman–Wunsch, avec le score

$$s(x_i, y_j) := P'_{ij}(x, y),$$

et des pénalités pour les *trous* (d et e) égales à zéro. Deux groupes sont alignés selon le meilleur alignement de deux séquences, une prise dans chaque groupe.

– Raffinement itératif.

On partitionne de façon aléatoire l'ensemble S en deux sous-groupes, auxquels on fait subir les étapes 4 et 5.

4.8 Exercices

Exercice 4.8.1. Programmation

1. *Simuler une chaîne de Markov $\{X_n\}$, de $n = 1$ à $n = 5000$ à valeurs dans $E = \{\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{t}\}$, en utilisant trois matrices de transition P_1 , P_2 et P_3 distinctes, en changeant de matrice de transition tous les 200 à 400 nucléotides (en variant les longueurs des plages homogènes).*
2. *Retrouver les trois matrices et les plages homogènes à l'aide de l'algorithme d'Audic-Claverie.*
3. *Tester l'algorithme de chaîne de Markov cachée sur le même jeu de données, avec ou sans la donnée des trois matrices P_i .*
4. *Recommencer l'opération avec des matrices estimées sur les trois types de plage d'une séquence génomique prokaryote annotée. Appliquer ensuite les mêmes algorithmes à la séquence en question, et comparer les résultats obtenus avec l'annotation proposée dans la base de donnée.*
5. *Appliquer maintenant à cette séquence un algorithme de chaîne semi-markovienne cachée, qui tient compte du fait qu'une plage codante commence par un codon START et finit par un codon STOP.*

Chapitre 5

Contrôle et filtrage des Chaînes de Markov

Introduction

Considérons un mobile (par exemple un avion ou un satellite) dont on veut contrôler la trajectoire, laquelle est soumise à des perturbations aléatoires. Le but du contrôle peut être notamment de rapprocher la trajectoire du mobile d'une trajectoire nominale désirée. Le problème est très différent suivant que la trajectoire perturbée est ou non observée directement.

Après une brève section sur le contrôle optimal déterministe, nous présenterons des notions sur le contrôle des chaînes de Markov, puis celui des suites gaussiennes, avec un coût quadratique. Nous aborderons ensuite le problème du “filtrage” (c'est à dire le suivi d'un mobile qui suit un mouvement aléatoire, et dont la trajectoire est partiellement observée) des chaînes de Markov, et des suites gaussiennes, dont la solution est donnée par le célèbre filtre de Kalman–Bucy. Nous clôturerons ce chapitre par le problème de contrôle linéaire quadratique, avec observation partielle, dont la solution combine le filtre de Kalman et le contrôle linéaire avec coût quadratique.

5.1 Contrôle optimal déterministe

On considère le système dynamique suivant contrôlé en temps discret :

$$X_n = f(X_{n-1}, u_n), n \geq 1, X_0 \text{ donné ,}$$

où $X_n \in E \subset \mathbb{R}^d$, $u_n \in U \subset \mathbb{R}^k$, $f : E \times U \rightarrow E$. La suite $\{u_n, n = 1, 2, \dots\}$ constitue le “contrôle” que l’on peut choisir à chaque instant n dans l’ensemble des contrôles admissibles U , le but étant de minimiser un coût de la forme :

$$J(u) = \sum_{n=1}^N L(X_n, u_n).$$

C’est-à-dire que l’on cherche $u^* = (u_1^*, \dots, u_N^*)$ tel que

$$J(u^*) = \min_{u \in U^N} J(u).$$

En admettant qu’un tel contrôle optimal existe (on peut donner des conditions pour que cela soit le cas ; l’existence est triviale si U est un ensemble fini), on va maintenant donner un algorithme permettant de le calculer. Pour cela on introduit les quantités suivantes :

$$\Phi(n, x) = \min_{u_k \in U, n \leq k \leq N} \sum_{k=n}^N L(X_k, u_k),$$

où $X_{n-1} = x$. On a alors

Equation de la programmation dynamique (R. Bellman).

$$\Phi(n, x) = \min_{u \in U} \{L(f(x, u), u) + \Phi(n+1, f(x, u))\}$$

Cette équation provient du fait suivant :

si $u^{*,n} = (u_n^*, u_{n+1}^*, \dots, u_N^*)$ est optimal pour le problème de contrôle entre n et N , avec la condition initiale $X_{n-1} = x$, alors $u^{*,n+1} \stackrel{\text{def}}{=} (u_{n+1}^*, \dots, u_N^*)$ est optimal pour le problème de contrôle entre $n+1$ et N , avec la condition initiale $X_n = f(x, u_n^*)$.

Algorithme de la programmation dynamique

On suppose maintenant que E est un ensemble fini (si ce n’est pas le cas, on est obligé de “discrétiser” l’espace d’états, pour se ramener à un ensemble fini).

L’algorithme progresse de façon rétrograde à partir de l’instant final N , pour le calcul des $\Phi(n, x)$, pour $n = N, N-1, \dots, 1$, et tous les $x \in E$.

• **Instant N** : pour chaque $x \in E$, on calcule

$$\Phi(N, x) = \min_{u \in U} L(f(x, u), u),$$

et on note $u^*(N, x)$ l’un des arguments qui réalise ce minimum.

- **Passage de $n + 1$ à n** : pour chaque $x \in E$, on calcule :

$$\Phi(n, x) = \min_{u \in U} \{L(f(x, u), u) + \Phi(n + 1, f(x, u))\},$$

et on note $u^*(n, x)$ l'un des arguments qui réalise ce minimum.

A la fin des calculs, on dispose de toutes les quantités $\{\Phi(n, x); 1 \leq n \leq N, x \in E\}$, et en particulier de

$$\Phi(1, x) = \min_{u_1, \dots, u_N \in U} J(u), \text{ si } X_0 = x,$$

pour tout $x \in E$.

A condition d'avoir gardé en mémoire toutes les valeurs $\{u^*(n, x); 1 \leq n \leq N, x \in E\}$, on peut maintenant construire la trajectoire optimale (et surtout déterminer un contrôle optimal) en repartant dans le sens "usuel" du temps :

$$X_1^* = f(X_0, u^*(1, X_0)),$$

$$X_n^* = f(X_{n-1}^*, u^*(n, X_{n-1}^*)),$$

$$X_N^* = f(X_{N-1}^*, u^*(N, X_{N-1}^*)).$$

5.2 Contrôle des chaînes de Markov

On suppose maintenant que $\{X_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ est une chaîne de Markov contrôlée à valeurs dans E dénombrable, c'est-à-dire que son évolution est régie par :

$$X_n = f(X_{n-1}, Y_n, u_n), \quad n \geq 1, \quad X_0 \in E \text{ donnée,}$$

où $\{Y_n, n \geq 1\}$ est une suite de v.a. indépendantes et de même loi à valeurs dans F , $\{u_n, n \geq 1\}$ est une suite de v.a. à valeurs dans U , tel que pour tout $n \geq 1$, u_n est $\sigma(X_{n-1})$ mesurable et $f : E \times F \times U \rightarrow E$. On vérifie aisément que $\{X_n, n \geq 0\}$ définie ainsi est une chaîne de Markov. On cherche à minimiser le coût

$$J(u) = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N L(X_n, u_n).$$

On va voir qu'un contrôle optimal $u^* = (u_1^*, \dots, u_N^*)$ est tel que pour tout n , u_n^* ne dépend que de X_{n-1} , ce qui fait que la suite $\{X_n^*, 0 \leq n \leq N\}$ correspondante est une chaîne de Markov.

On introduit comme à la section précédente les quantités ($1 \leq n \leq N$, $x \in E$) :

$$\Phi(n, x) = \min_{u_k \in \mathcal{U}_k, n \leq k \leq N} \mathbb{E}_{n,x} \sum_{k=n}^N L(X_k, u_k),$$

où \mathcal{U}_k désigne l'ensemble des v.a. $\sigma(X_{k-1})$ mesurables à valeurs dans U , et $\mathbb{E}_{n,x}$ désigne l'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(\cdot | X_{n-1} = x)$. On a alors **l'équation de la programmation dynamique**

$$\Phi(n, x) = \min_{u \in U} \mathbb{E}\{L(f(x, Y_n, u), u) + \Phi(n+1, f(x, Y_n, u))\}$$

et on note $u^*(n, x)$ une valeur de $u \in U$ qui réalise ce minimum.

L'algorithme de la programmation dynamique consiste alors, comme dans le cas déterministe, à calculer dans le sens rétrograde du temps, les $\Phi(n, x)$ et $u^*(n, x)$, en commençant par $n = N$, et en finissant avec $n = 1$. On peut alors ensuite mettre en oeuvre le contrôle optimal en utilisant à l'instant n le contrôle $u^*(n, X_{n-1})$, en commençant à l'instant $n = 1$.

Remarque 5.2.1. *On pourrait plus généralement chercher un contrôle optimal dans la classe des contrôles $u = (u_1, \dots, u_N)$ tels que pour tout n , u_n dépend de $(X_0, X_1, \dots, X_{n-1})$. On montrerait qu'il existe un contrôle optimal "markovien", i.e. tel que chaque u_n ne dépend que de X_{n-1} , si bien que la suite $\{X_n\}$ est bien une chaîne de Markov.*

5.3 Contrôle optimal linéaire quadratique

Dans cette section, on suppose que $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ est une suite gaussienne à valeurs dans \mathbb{R}^d , qui satisfait la formule de récurrence linéaire :

$$X_n = AX_{n-1} + Bu_n + f_n + \eta_n, \quad n \geq 1,$$

avec $X_0, \eta_1, \eta_2, \dots$ une suite indépendante de vecteurs aléatoires gaussiens, $X_0 \simeq N(\bar{X}_0, \lambda_0)$, et $\eta_n \simeq N(0, Q)$, et les f_n sont des vecteurs donnés dans \mathbb{R}^d . On suppose que les contrôles u_n prennent leurs valeurs dans $U = \mathbb{R}^k$,

que A est une matrice $d \times d$ et B une matrice $d \times k$. On cherche à minimiser la fonctionnelle

$$J(u) = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N [\langle FX_n, X_n \rangle + \langle Ru_n, u_n \rangle],$$

où F (resp. R) est une matrice symétrique $d \times d$ (resp. $k \times k$), et R est définie positive.

L'intérêt du problème de contrôle linéaire quadratique est que l'on va donner une formule explicite pour le contrôle optimal.

Remarque 5.3.1. *On pourrait utiliser une fonctionnelle de coût plus générale, de la forme*

$$J(u) = \sum_{n=1}^N [\langle F(X_n - x_n), X_n - x_n \rangle + \langle Ru_n, u_n \rangle],$$

où (x_1, \dots, x_N) est la "cible" dont on cherche à se rapprocher, le coût pondérant l'éloignement entre X_n et x_n , et la norme du contrôle que l'on applique. Cependant un problème de ce type peut se mettre sous la forme de notre problème ci-dessus, en posant $\tilde{X}_n = X_n - x_n$, grâce à l'introduction des vecteurs f_n dans la formule de récurrence.

Avec les notations de la section 5.2. on a le

Théorème 5.3.2. *Pour tout $1 \leq n \leq N$, $x \in \mathbb{R}^d$,*

$$\Phi(n, x) = \langle G_n x, x \rangle + 2\langle h_n, x \rangle + c_n,$$

et $u^*(n, x) = -(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*[(F + G_{n+1})(Ax + f_n) + h_{n+1}]$ où la suite $\{(G_n, h_n, c_n); 1 \leq n \leq N\}$ est définie par la récurrence rétrograde :

$$\begin{aligned} G_n &= A^*(I - (F + G_{n+1})B(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*)(F + G_{n+1})A, \\ h_n &= A^*(I - (F + G_{n+1})B(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*)[(F + G_{n+1})f_n + h_{n+1}] \\ c_n &= c_{n+1} + Tr[(F + G_{n+1})Q] + \langle (F + G_{n+1})f + 2h_{n+1}, f_n \rangle - \\ &< B(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*[(F + G_{n+1})f_n + h_{n+1}], (F + G_{n+1})f_n + h_{n+1} > \\ &\text{et } G_{N+1} = 0, \quad h_{N+1} = 0, \quad c_{N+1} = 0. \end{aligned}$$

La preuve du théorème repose sur le résultat élémentaire :

Lemme 5.3.3. *Soit P une matrice $k \times k$ autoadjointe définie positive, et $f \in \mathbb{R}^k$. Alors*

$$\min_{u \in \mathbb{R}^k} [\langle Pu, u \rangle + 2\langle u, f \rangle] = -\langle P^{-1}f, f \rangle,$$

et le minimum est atteint au point $u^* = -Pf$.

PREUVE DU THÉORÈME : admettons la formule de l'énoncé pour tout $\Phi(n+1, x)$. Alors

$$\begin{aligned} \Phi(n, x) &= \min_{u \in \mathbb{R}^k} \mathbb{E}_{n,x} [\langle FX_n, X_n \rangle + \langle Ru, u \rangle + \langle G_{n+1}X_n, X_n \rangle + 2\langle h_{n+1}, X_n \rangle] + c_{n+1} \\ &= \langle (F + G_{n+1})(Ax + f_n), Ax + f_n \rangle + 2\langle h_{n+1}, Ax + f_n \rangle + c_{n+1} + \text{Tr}[(F + G_{n+1})Q] \\ &\quad + \min_u \{ \langle (R + B^*(F + G_{n+1})B)u, u \rangle + 2\langle B^*[(F + G_{n+1})(Ax + f_n) + h_{n+1}], u \rangle \} \end{aligned}$$

La formule pour $u^*(n, x)$ découle alors du lemme 5.3.3, et en outre

$$\begin{aligned} \Phi(n, x) &= \langle A^*(I - (F + G_{n+1})B(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*)(F + G_{n+1})Ax, x \rangle \\ &\quad + 2\langle A^*(I - (F + G_{n+1})B(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*)[(F + G_{n+1})f_n + h_{n+1}], x \rangle \\ &\quad + c_{n+1} + \text{Tr}[(F + G_{n+1})Q] + \langle (F + G_{n+1})f_n + 2h_{n+1}, f_n \rangle \\ &\quad - \langle B(R + B^*(F + G_{n+1})B)^{-1}B^*[(F + G_{n+1})f_n + h_{n+1}], (F + G_{n+1})f_n + h_{n+1} \rangle, \end{aligned}$$

d'où l'on déduit les formules de récurrence. Comme le calcul ci-dessus est correct avec $n = N$, à condition de poser $G_{N+1} = 0$, $h_{N+1} = 0$, $c_{N+1} = 0$, le résultat est établi par récurrence.

Remarque 5.3.4. *Les matrices de covariance Λ_0 et Q n'interviennent que dans les constantes c_n ; en particulier le contrôle optimal n'en dépend pas. Il est le même dans le cas $\Lambda_0 = Q = 0$, qui est le cas déterministe.*

5.4 Filtrage des chaînes de Markov

On se donne une chaîne de Markov $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans E , qui n'est pas observée. On observe la suite $\{Y_n, n \in \mathbb{N}\}$ donnée par

$$Y_n = h(X_n, \xi_n),$$

où les ξ_n sont des v.a. i.i.d, globalement indépendantes de la chaîne $\{X_n\}$, à valeurs dans l'ensemble dénombrable G , et $f : E \times G \rightarrow F$ est connue.

La situation est en fait celle des *chaînes de Markov cachées*, mais cette fois on se place dans une situation dynamique, où l'on cherche à chaque instant n à “estimer” la vraie valeur de X_n , au vu des observations Y_1, Y_2, \dots, Y_n . On veut un algorithme “récursif”, tel que à l'instant $n + 1$, le calcul utilise le résultat du calcul de l'instant n , et la nouvelle observation Y_{n+1} , sans qu'il soit nécessaire de réutiliser les anciennes observations Y_1, Y_2, \dots, Y_n . Le but est de pouvoir faire tourner l'algorithme en “temps réel”. Il s'avère que la bonne quantité à calculer à chaque instant n est la loi conditionnelle Π_n de X_n , sachant Y_1, Y_2, \dots, Y_n . On introduit également la loi conditionnelle $\Pi_{n|n-1}$ de X_n , sachant Y_1, Y_2, \dots, Y_{n-1} .

Pour tout $x \in E, y \in F$, on pose

$$\begin{aligned} g(x, y) &= \mathbb{P}(h(x, \xi_n) = y) \\ &= \mathbb{P}(Y_n = y | X_n = x). \end{aligned}$$

L'évolution des lois conditionnelles $\{\Pi_n\}$ est alors donnée par le

Théorème 5.4.1. *Pour tout $n \geq 1$,*

$$\begin{aligned} \Pi_{n|n-1}(x) &= (\Pi_{n-1}P)_x \\ \Pi_n(x) &= \frac{g(x, Y_n)\Pi_{n|n-1}(x)}{\sum_{x' \in F} g(x', Y_n)\Pi_{n|n-1}(x')} \end{aligned}$$

PREUVE On peut considérer que la chaîne (X_n) est générée par la formule de récurrence

$$X_n = f(X_{n-1}, \eta_n),$$

où les $\{\eta_n\}$ sont i.i.d., globalement indépendants des $\{\xi_n\}$. Il en résulte en particulier que

$$\mathbb{P}(X_n = x | Y_1, \dots, Y_{n-1}, X_{n-1}) = \mathbb{P}(X_n = x | X_{n-1}),$$

d'où :

$$\begin{aligned} \Pi_{n|n-1}(x) &= \mathbb{P}(X_n = x | Y_1, \dots, Y_{n-1}) \\ &= \mathbb{E} [\mathbb{P}(X_n = x | X_{n-1}) | Y_1, \dots, Y_{n-1}] \\ &= (\Pi_{n-1}P)_x. \end{aligned}$$

Pour établir la seconde relation, notons tout d'abord que si $\mathbb{P}^{Y_1, \dots, Y_{n-1}}$ désigne la probabilité conditionnelle $\mathbb{P}(\cdot | Y_1, \dots, Y_{n-1})$,

$$\mathbb{P}(X_n = x | Y_1, \dots, Y_{n-1}, Y_n) = \mathbb{P}^{Y_1, \dots, Y_{n-1}}(X_n = x | Y_n)$$

Mais pour toute probabilité \mathbf{Q} ,

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(X_n = x | Y_n) &= H(x, Y_n), \text{ où} \\ H(x, y) &= \mathbf{Q}(X_n = x | Y_n = y) \\ &= \frac{\mathbf{Q}(Y_n = y | X_n = x) \mathbf{Q}(X_n = x)}{\sum_{x'} \mathbf{Q}(Y_n = y | X_n = x') \mathbf{Q}(X_n = x')} \end{aligned}$$

et la seconde relation s'en déduit, puisque

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{Y_1, \dots, Y_{n-1}}(Y_n = y | X_n = x) &= \mathbb{P}(h(x, \xi_n) = y) \\ &= g(x, y). \end{aligned}$$

5.5 Le filtre de Kalman–Bucy

Dans le cas où “tout est gaussien”, les calculs se simplifient, et on aboutit au célèbre “filtre de Kalman–Bucy”, qui est universellement utilisé. Commentons tout d'abord par une

5.5.1 Motivation

Considérons un satellite, qui se déplace dans l'espace selon l'équation différentielle

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(x(t)), \quad x(0) = x_0.$$

Comme le calcul sur ordinateur impose de discrétiser l'équation (et que nous ne voulons pas présenter le filtre de Kalman en temps continu), on va remplacer l'EDO ci-dessus par une formule de récurrence sur les $x_n = x(n\tau)$, où τ est le pas de temps (autrement dit $1/\tau$ est la fréquence d'échantillonnage). La formule exacte est

$$x_{n+1} = x_n + \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} f(x(s)) ds,$$

que l'on va approcher par le schéma numérique le plus simple : le schéma d'Euler, dont la précision est acceptable si τ est suffisamment petit :

$$x_{n+1} = x_n + \tau f(x_n), \quad n \geq 0, \quad x_0 \text{ donné.}$$

En réalité cette trajectoire est une trajectoire théorique, ou “nominale”, au sens où l'équation ci-dessus n'est pas exacte, car il est illusoire de prétendre prendre en compte toutes les attractions de tous les corps célestes (le passage de certains d'entre eux à proximité du satellite est imprévisible, et peut être considéré comme aléatoire), la forme exacte de la terre, etc. D'où la justification de l'introduction d'un modèle aléatoire pour l'évolution de x_n :

$$x_{n+1} = x_n + \tau f(x_n) + V_n, \quad n \geq 0, \quad x_0 \text{ donné,}$$

où les V_n sont des vecteurs aléatoires Gaussiens centrés. Dans beaucoup de situations, les perturbations sont suffisamment petites pour que l'on puisse approcher valablement l'écart $X_n = x_n - x_n^0$ entre x_n et la trajectoire nominale x_n^0 (ceci d'autant que le filtrage de Kalman que nous allons présenter sert à guider le satellite pour que sa trajectoire réelle reste proche de la trajectoire nominale) par la solution d'une équation aux différences linéarisée :

$$X_{n+1} = A_n X_n + V_n,$$

où

$$A_n = I + \tau \nabla_x f(x_n^0).$$

Notons que cette approximation n'est pas toujours valable, et des méthodes plus compliquées doivent alors être mises en oeuvre.

Pour suivre le satellite, des observations radar sont prises depuis la terre. Mais ces observations ne concernent pas forcément tout le vecteur X_n (typiquement, X_n désigne le couple position–vitesse du satellite à l'instant $n\tau$, alors que le radar ne mesure que la position), et en outre cette mesure est entachée d'une erreur (comme toute erreur physique!). Sans compter que suivant la position du satellite dans sa trajectoire il est observé par l'un ou l'autre des radars prévus pour le suivre, ou par aucun d'entre eux. On peut donc modéliser ces mesures par l'observation à chaque instant n de

$$Y_n = H_n X_n + W_n,$$

où $H_n = 0$ aux instants où le satellite n'est pas observé, et les W_n sont de nouveau des v. a. gaussiens centrés. En outre la condition initiale est elle aussi un vecteur aléatoire, que l'on suppose gaussien.

5.5.2 Solution du problème

On suppose que X_n prend ses valeurs dans \mathbb{R}^d , Y_n dans \mathbb{R}^k , et que

$$\begin{aligned} X_n &= AX_{n-1} + \eta_n, \quad n \geq 1 \\ Y_n &= HX_n + \xi_n, \quad n \geq 1, \end{aligned}$$

avec $X_0, \eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \dots, \eta_n, \xi_n, \dots$ indépendants, X_0 de loi $N(\bar{X}_0, P_0)$, les η_n de loi $N(0, Q)$ et les ξ_n de loi $N(0, R)$. On suppose que la matrice R est inversible. Bien sûr, il ne s'agit plus de chaîne de Markov à valeurs dans un ensemble dénombrable.

On note encore Π_n la loi conditionnelle de X_n , sachant Y_1, \dots, Y_n .

Théorème 5.5.1. *La loi Π_n est la loi $N(\hat{X}_n, \Lambda_n)$, où $(\hat{X}_n, \Lambda_n)_{n \geq 0}$ est donnée par la formule de récurrence :*

$$\begin{aligned} \hat{X}_{n+1} &= A\hat{X}_n + \Sigma_n H^* (H\Sigma_n H^* + R)^{-1} (Y_{n+1} - HA\hat{X}_n) \\ \Sigma_n &= A\Lambda_n A^* + Q \\ \Lambda_{n+1} &= \Sigma_n - \Sigma_n H^* (H\Sigma_n H^* + R)^{-1} H\Sigma_n \\ \hat{X}_0 &= \bar{X}_0, \quad \Lambda_0 = P_0 \end{aligned}$$

On va montrer le théorème. Notons que l'on pourrait le déduire du résultat de la section précédente, préalablement adapté au cas de lois absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d (resp. \mathbb{R}^k), au lieu de loi sur l'espace discret E (resp. F).

Rappelons tout d'abord deux résultats concernant le conditionnement dans le cadre gaussien.

Proposition 5.5.2. *Soit $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$ un vecteur aléatoire gaussien de dimension $d + k$, de loi $N\left[\begin{pmatrix} \bar{X} \\ \bar{Y} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}\right]$. On suppose $\Sigma_{22} > 0$. Alors, la loi $\hat{\mu}_Y = N(\hat{X}, \hat{\Sigma})$, avec*

$$\begin{aligned} (i) \quad \hat{X} &= \bar{X} + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(Y - \bar{Y}) \\ (ii) \quad \hat{\Sigma} &= \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \end{aligned}$$

est une loi de probabilité conditionnelle de X , sachant Y , c'est-à-dire que pour tout $B \in \mathcal{B}_d$,

$$\mathbb{P}(X \in B | Y) = \hat{\mu}_Y(B).$$

En outre, $\hat{\Sigma} = \text{Cov}(X - \hat{X})$.

PREUVE

Si \hat{X} désigne le vecteur aléatoire défini par (i), on pose

$$\tilde{X} = X - \hat{X}.$$

On montre facilement que $\begin{pmatrix} \tilde{X} \\ Y \end{pmatrix}$ est un vecteur aléatoire gaussien, et que

$$\text{Cov}(\tilde{X}, Y) = 0.$$

Donc \tilde{X} et Y sont indépendants, alors que \hat{X} est une fonction de Y . Soit maintenant $\varphi \in C_b(\mathbb{R}^d)$.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\varphi(X)|Y] &= \mathbb{E}[\varphi(\hat{X} + \tilde{X})|Y] \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(\hat{X} + x) \mathbb{P}_{\tilde{X}}(dx) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) \hat{\mu}_Y(dx), \end{aligned}$$

avec $\hat{\mu}_Y = N(\hat{X}, \hat{\Sigma})$, si $\hat{\Sigma} = \text{Cov}(\tilde{X})$.

Enfin

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\tilde{X}) &= \text{Cov}(X - \hat{X}) \\ &= \text{Cov}(X - \bar{X} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(Y - \bar{Y})) \\ &= \Sigma_{11} - 2\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \\ &= \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}. \end{aligned}$$

Proposition 5.5.3. Soit $\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$ un vecteur aléatoire gaussien de dimension

$d + k + \ell$, tel que Y et Z soient indépendants. On note $\hat{\mu}_Y = N(\hat{X}, \hat{\Sigma})$ la loi conditionnelle de X sachant Y , et $\hat{\mu}_{Y,Z} = N(\hat{\hat{X}}, \hat{\hat{\Sigma}})$ la loi conditionnelle de X sachant (Y, Z) . On note à nouveau $\bar{X} = \mathbb{E}(X)$. Alors

$$\begin{aligned} (j) \quad \hat{\hat{X}} &= \hat{X} + \mathbb{E}(X - \bar{X}|Z) = \hat{X} + \hat{\hat{X}} \\ (jj) \quad \hat{\hat{\Sigma}} &= \hat{\Sigma} - \text{Cov}(\hat{\hat{X}}). \end{aligned}$$

PREUVE On suppose que $\mathbb{E}(Z) = 0$ (ce qui ne restreint pas la généralité).

Désignons par \mathcal{U} , \mathcal{Y} et \mathcal{Z} les sous-espaces vectoriels fermés de $L^2(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ engendrés respectivement par :

- les constantes et les coordonnées de Y , Z ;
- les constantes et les coordonnées de Y
- les coordonnées de Z .

Alors $\mathcal{U} = \mathcal{Y} \oplus \mathcal{Z}$, et $Y \perp \mathcal{Z}$.

Donc, pour tout $1 \leq i \leq d$, $\hat{\hat{X}}_i$, la projection orthogonale de X_i sur \mathcal{U} , est la somme de \hat{X}_i , la projection orthogonale de X_i sur \mathcal{Y} , et de $\mathbb{E}(X_i - \bar{X}_i | Z)$, la projection orthogonale de X_i sur \mathcal{Z} . (j) est établi.

Donc

$$X - \hat{X} = X - \hat{\hat{X}} + \mathbb{E}(X - \bar{X} | Z)$$

pour tout $1 \leq i, j \leq d$, $\mathbb{E}(X_i - \bar{X}_i | Z) \in \mathcal{Z} \subset \mathcal{U}$, donc est orthogonal dans $L^2(\Omega, Z, \mathbb{P})$ à $X_j - \hat{X}_j$.

Ceci entraîne que

$$Cov(X - \hat{X}) = Cov(X - \hat{\hat{X}}) + Cov(\mathbb{E}(X - \bar{X} | Z)),$$

ce qui joint à la dernière affirmation de la Proposition 5.5.2, établit (jj). \square

On peut maintenant passer à la :

PREUVE DU THÉORÈME 5.5.1

Puisque $(X_n, Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$ est un vecteur aléatoire gaussien, il résulte de la Proposition 5.5.2 que $\Pi_n = N(\hat{X}_n, \Lambda_n)$, où \hat{X}_n est une fonction affine de Y_1, \dots, Y_n , et $\Lambda_n = Cov(X_n - \hat{X}_n)$. Il nous reste à calculer $(\hat{X}_{n+1}, \Lambda_{n+1})$ en fonction de (\hat{X}_n, Λ_n) . Puisque

$$X_{n+1} = AX_n + \eta_{n+1}$$

avec η_{n+1} centré et indépendant de (X_n, Y_1, \dots, Y_n) ,

$$\mathbb{E}(X_{n+1} | Y_1, \dots, Y_n) = A\hat{X}_n,$$

et en outre

$$Cov(X_{n+1} - A\hat{X}_n) = A\Lambda_n A^* + Q.$$

Il nous reste à appliquer la Proposition 5.5.3, pour “rajouter le conditionnement par Y_{n+1} ”. Pour cela, il nous faut définir l’“innovation” :

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= Y_{n+1} - \mathbb{E}(Y_{n+1}|Y_1, \dots, Y_n) \\ &= Y_{n+1} - HA\hat{X}_n \\ &= HA\tilde{X}_n + H\eta_{n+1} + \xi_{n+1}, \end{aligned}$$

où $\tilde{X}_n = X_n - \hat{X}_n$.

Notons que le v.a. $(Y_1, \dots, Y_n, I_{n+1})$ est un vecteur aléatoire gaussien, et que les coordonnées de I_{n+1} sont orthogonales dans $L^2(\Omega, Z, \mathbb{P})$ à celles de Y_1, \dots, Y_n . Donc (Y_1, \dots, Y_n) et I_{n+1} sont indépendants, et de plus I_{n+1} est centré. Comme en outre $\sigma(Y_1, \dots, Y_n, Y_{n+1}) = \sigma(Y_1, \dots, Y_n, I_{n+1})$, on va pouvoir utiliser la Proposition 5.5.3, qui nous dit que

$$\begin{aligned} \hat{X}_{n+1} &= A\hat{X}_n + \mathbb{E}(X_{n+1} - \mathbb{E}X_{n+1}|I_{n+1}) \\ \text{et } \Lambda_{n+1} &= A\Lambda_n A^* + Q - \text{Cov}(\hat{X}_{n+1} - A\hat{X}_n) \end{aligned}$$

L’espérance conditionnelle ci-dessus se calcule à l’aide de la Proposition 5.5.2. Or

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(X_{n+1}I_{n+1}^*) &= A\mathbb{E}\left[X_n(X_n - \hat{X}_n)^*\right]A^*H^* + QH^* \\ &= A\Lambda_n A^*H^* + QH^* \\ \mathbb{E}I_{n+1}I_{n+1}^* &= HA\Lambda_n A^*H^* + HQH^* + R \end{aligned}$$

Donc

$$\hat{X}_{n+1} = A\hat{X}_n + (A\Lambda_n A^* + Q)H^* [H(A\Lambda_n A^* + Q)H^* + R]^{-1} (Y_{n+1} - HA\hat{X}_n)$$

et

$$\begin{aligned} \Lambda_{n+1} &= A\Lambda_n A^* + Q \\ &\quad - (A\Lambda_n A^* + Q)H^* [H(A\Lambda_n A^* + Q)H^* + R]^{-1} H(A\Lambda_n A^* + Q), \end{aligned}$$

ce qui démontre le théorème.

5.6 Contrôle avec observation partielle

On considère maintenant le problème suivant :

$$\begin{aligned} X_n &= AX_{n-1} + Bu_n + f_n + \eta_n, \quad n \geq 1, \\ Y_n &= AX_n + \xi_n \end{aligned}$$

où à nouveau $X_0, \eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \dots$ est une suite de v.a. gaussiens indépendants, X_0 et les η_n de dimension d , les ξ_n de dimension k de matrice de covariance R inversible, u_n à valeurs dans \mathbb{R}^ℓ , choisi parmi les suites adaptées à la suite $\{Y_n\}$, i.e. tel que pour tout n , u_n soit une fonction de Y_1, \dots, Y_{n-1} , et on cherche à minimiser le critère :

$$J(u) = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N [\langle FX_n, X_n \rangle + \langle Qu_n, u_n \rangle].$$

On aura besoin du résultat technique suivant :

On définit les suites

$$\begin{aligned} X_n^0 &= AX_{n-1}^0 + f_n + \eta_n, \quad n \geq 1, X_0^0 = X_0, \\ Y_n^0 &= HX_n^0 + \xi_n, \quad n \geq 1, \end{aligned}$$

et on pose $\mathcal{Y}_n = \sigma(Y_1, \dots, Y_n)$, $\mathcal{Y}_n^0 = \sigma(Y_1^0, \dots, Y_n^0)$, $n \geq 1$, $\mathcal{Y}_0 = \mathcal{Y}_0^0 = \{\emptyset, \Omega\}$. On a alors le

Lemme 5.6.1. *Pour tout n , $\mathcal{Y}_n = \mathcal{Y}_n^0$.*

PREUVE Posons

$$\begin{aligned} X_n^u &= AX_{n-1}^u + Bu_n, \quad n \geq 1, X_0^u = 0, \\ Y_n^u &= HX_n^u, \quad n \geq 1. \end{aligned}$$

Puisque (u_1, \dots, u_n) est \mathcal{Y}_{n-1} mesurable, il en est de même de (Y_1^u, \dots, Y_n^u) . Mais

$$Y_n = Y_n^0 + Y_n^u, \quad n \geq 1.$$

Donc (Y_1^0, \dots, Y_n^0) est \mathcal{Y}_n mesurable, soit $\mathcal{Y}_n^0 \subset \mathcal{Y}_n$. Réciproquement, puisque u_1 est déterministe (car \mathcal{Y}_0 mesurable), Y_1^u est connu, donc $Y_1 = Y_1^0 + Y_1^u$ est une fonction de Y_1^0 , soit $\mathcal{Y}_1 \subset \mathcal{Y}_1^0$. Supposons que $\mathcal{Y}_n \subset \mathcal{Y}_n^0$. Alors (u_1, \dots, u_{n+1}) est \mathcal{Y}_n^0 mesurable, et donc aussi Y_{n+1}^u , d'où

$$Y_{n+1} = Y_{n+1}^0 + Y_{n+1}^u$$

est \mathcal{Y}_{n+1}^0 mesurable. □

Une conséquence du lemme 5.6.1 est que la suite de tribus $(\mathcal{Y}_1, \dots, \mathcal{Y}_N)$ ne dépend pas du choix du contrôle choisi. Maintenant, il est clair que

$$J(u) = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N [\mathbb{E}^{\mathcal{Y}_n}(\langle FX_n, X_n \rangle) + \langle Ru_n, u_n \rangle]$$

Or

$$X_n = \hat{X}_n + \tilde{X}_n,$$

avec $\hat{X}_n = \mathbb{E}(X_n | \mathcal{Y}_n)$, et \tilde{X}_n est indépendant de \mathcal{Y}_n . Donc si l'on note $\Lambda_n = \text{cov}(\tilde{X}_n)$,

$$J(u) = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N \left[\langle F \hat{X}_n, \hat{X}_n \rangle + \langle R u_n, u_n \rangle + \text{Tr} F \Lambda_n \right].$$

On est donc ramené au problème suivant (cf. la section 5.5) :

$$\begin{aligned} \hat{X}_n &= (I - \Sigma_{n-1} H^* (H \Sigma_{n-1} H^* + R)^{-1} H) A \hat{X}_{n-1} + B u_n + f_n \\ &\quad + \Sigma_{n-1} H^* (H \Sigma_{n-1} H^* + R)^{-1} Y_n \\ \hat{X}_0 &= \bar{X}_0 \end{aligned}$$

$$\min \hat{J}(u) = \mathbb{E} \sum_{n=1}^N \left[\langle F \hat{X}_n, \hat{X}_n \rangle + \langle R u_n, u_n \rangle \right],$$

qui est un problème de contrôle optimal “déterministe” (puisque les Y_n sont observés, donc connus), dont la solution est donnée par le théorème 5.3.2.

5.7 Exercices

Exercice 5.7.1. Programmation On reprend le modèle du filtre de Kalman–Bucy, avec $d = k = 1$, $A = 0.98$, $X_0 = 1$, $Q = 2$, $R = 2$, $H_n = \cos(\pi n/13)$ (ou une autre fonction périodique à choisir).

1. Simuler pour $1 \leq n \leq 100$, X_n et Y_n .
2. Ecrire un programme qui calcule l'estimée de Kalman \hat{X}_n de X_n , pour $1 \leq n \leq N$. Tracer (X_n, \hat{X}_n) , et l'erreur d'estimation.
3. Recommencer la seconde étape avec d'autres valeurs de A , et éventuellement de Q et R . Dans quelle mesure le filtre de Kalman tolère-t-il les erreurs dans le modèle ?

Exercice 5.7.2. 1. Donner les formules du filtre de Kalman dans le cas non homogène, où les matrices A et H dépendent de n . Autrement dit, le modèle du début de la section 5.5.2 est remplacé par

$$\begin{aligned} X_n &= A_n X_{n-1} + \eta_n, \quad n \geq 1 \\ Y_n &= H_n X_n + \xi_n, \quad n \geq 1. \end{aligned}$$

2. On suppose maintenant données des applications mesurables bornées

$$y \rightarrow A(y) \text{ de } \mathbb{R}^k \text{ dans } \mathbb{R}d \times d,$$

$$y \rightarrow H(y) \text{ de } \mathbb{R}^k \text{ dans } \mathbb{R}k \times d,$$

et on suppose maintenant que les suites $\{X_n\}$ et $\{Y_n\}$ sont reliées par les formules

$$X_n = A(Y_n)X_{n-1} + \eta_n, \quad n \geq 1$$

$$Y_n = H(Y_n)X_n + \xi_n, \quad n \geq 1,$$

les hypothèses sur $(X_0, \eta_1, \xi_1, \dots, \eta_n, \xi_n, \dots)$ étant les mêmes qu'à la section 5.5.2. clairement la suite $\{(X_n, Y_n), n \geq 1\}$ n'est pas gaussienne. Montrer que pour tout $n \geq 1$, la loi conditionnelle de X_n , sachant Y_1, \dots, Y_n est une loi de Gauss, et préciser les formules de récurrence pour l'espérance et la matrice de covariance de cette loi. On dit que l'on est dans le cas d'un modèle "conditionnellement gaussien".

Chapitre 6

Le processus de Poisson

Introduction

Dans ce chapitre et les deux suivants, on va étudier des processus de Markov définis sur \mathbb{R}_+ , à valeurs dans un ensemble fini ou dénombrable E , qui sont constants entre leurs sauts qui se produisent à des instants aléatoires : on les appelle “processus markoviens de saut”.

Dans ce chapitre, nous allons introduire le “prototype” des processus markoviens de saut, à savoir le processus de Poisson.

Ce processus modélise des répartitions aléatoires de point sur \mathbb{R}_+ , qui peuvent correspondre à des instants de collision de particules, mais aussi à des instants d’arrivée de clients dans une file d’attente, d’appels à un central téléphonique.

6.1 Processus ponctuels et f.a. de comptage

Un **processus ponctuel** sur \mathbb{R}_+ se décrit par la donnée d’une suite croissante de points aléatoires

$$0 < T_1 < T_2 < \dots < T_n < \dots \text{ dans } \mathbb{R}_+$$

qui sont des v.a. définies sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Outre les inégalités ci-dessus, on suppose que $T_n \uparrow \infty, n \rightarrow \infty$.

On posera

$$\begin{aligned} S_1 &= T_1 \\ S_2 &= T_2 - T_1 \\ &\dots\dots\dots \\ S_n &= T_n - T_{n-1} \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

les v.a. T_n sont les instants où se produisent un événement, les S_n sont les délais ou les temps d'attente entre deux événements successifs.

On définit la **f.a. de comptage** $\{N_t, t \geq 0\}$ du **processus ponctuel** $\{T_n, n \in \mathbb{N}\}$ de la façon suivante :

$$\begin{aligned} N_t &= \sup\{n; T_n \leq t\} \\ &= \sum_{j \geq 1} \mathbf{1}_{\{T_j \leq t\}} \end{aligned}$$

N_t est le nombre d'événement qui se sont produits avant l'instant t .

Notons que $N_0 = 0$, puisque $T_1 > 0$ et pour tout $t > 0$, $N_t < \infty$ puisque $T_n \uparrow \infty, n \rightarrow \infty$.

Pour $0 \leq s < t$, $N_t - N_s$ est le nombre d'événements qui se sont produits dans l'intervalle de temps $]s, t]$.

Une trajectoire type du processus $\{N_t, t \geq 0\}$ est dessinée à la figure 6.1
Précisons que les trajectoires de $\{N_t\}$ sont *continues à droite*.

Notons que la donnée de $\{N_t, t \geq 0\}$ est équivalente à celle de la suite $\{T_n, n \in \mathbb{N}\}$, et que l'on a les relations :

$$\begin{aligned} \{N_t \geq n\} &= \{T_n \leq t\} \\ \{N_t = n\} &= \{T_n \leq t < T_{n+1}\} \\ \{N_s < n \leq N_t\} &= \{s < T_n \leq t\} \end{aligned}$$

6.2 Le processus de Poisson

Définition 6.2.1. On dit que le processus ponctuel $\{T_n, n \in \mathbb{N}\}$ ou sa f.a. de comptage $\{N_t, t \geq 0\}$ est un **processus de Poisson** si $\{N_t, t \geq 0\}$ est une f.a. à accroissements indépendants et stationnaires i.e. si

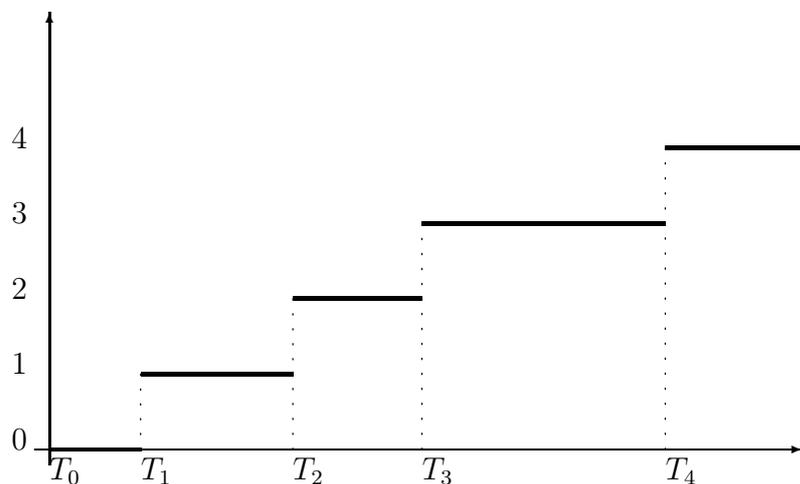


FIG. 6.1 – Trajectoire d'un processus de Poisson

- a) quels que soient $t_0 < t_1 < \dots < t_n$ dans \mathbb{R}_+ , les accroissements $\{N_{t_j} - N_{t_{j-1}}; 1 \leq j \leq n\}$ sont des v.a. indépendantes ;
- b) pour $0 \leq s < t$, la loi de $N_t - N_s$ ne dépend que de s et t que par la différence $t - s$.

La propriété b) est appelée la “stationarité des accroissements ” de $\{N_t\}$. Le nom “processus de Poisson” est justifié par la :

Proposition 6.2.2. Soit $\{N_t, t \geq 0\}$ la f.a. de comptage d'un processus de Poisson. Il existe $\lambda > 0$ tel que pour tous $0 \leq s < t$, la loi de $N_t - N_s$ est la loi de Poisson de paramètre $\lambda(t - s)$, i.e.

$$\mathbb{P}(N_t - N_s = k) = e^{-\lambda(t-s)}[\lambda(t-s)]^k/k!, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Remarque 6.2.3. Ce paramètre λ est appelé l'intensité du processus de Poisson $\{N_t, t \geq 0\}$. Il est égal au nombre moyen d'événements qui se produisent pendant un intervalle de temps de longueur unité, i.e.

$$\mathbb{E}[N_{t+1} - N_t] = \lambda.$$

PREUVE DE LA PROPOSITION 6.2.2 Pour tous $0 \leq s < t$, considérons la fonction génératrice de $N_t - N_s$, qui est l'application $u \rightarrow f_{t-s}(u)$ de $[0, 1]$ dans lui-même qui ne dépend que de $t - s$ et est définie par :

$$\begin{aligned} f_{t-s}(u) &= \mathbb{E}[u^{N_t - N_s}] \\ &= \sum_{k \geq 0} \mathbb{P}(N_t - N_s = k) u^k. \end{aligned}$$

Par la propriété a) de la définition,

$$f_t(u) = f_s(u) f_{t-s}(u), \quad 0 \leq s < t, \quad u \in [0, 1].$$

Il résulte de cette identité que

$$f_t(u) = [f_1(u)]^t$$

d'abord pour les t rationnels, puis pour tout t dans \mathbb{R}_+ car $t \rightarrow f_t(u)$ est décroissante.

Comme en outre

$$\begin{aligned} f_t(u) &\geq P(N_t = 0) \\ &= P(T_1 > t) \\ &\nearrow 1, \quad \text{quand } t \downarrow 0, \end{aligned}$$

$f_1(u) \neq 0$, et donc il existe $\lambda(u)$ dans \mathbb{R}_+ tel que

$$f_t(u) = e^{-t\lambda(u)}.$$

Puisque $u \rightarrow \exp(-\theta(1-u))$ est la fonction génératrice de la loi de Poisson de paramètre θ , il reste à montrer que

$$\lambda(u) = \lambda(0)(1-u).$$

Or clairement

$$\begin{aligned} \lambda(u) &= \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t} (1 - f_t(u)) \\ &= \lim_{t \downarrow 0} \sum_{k \geq 1} \frac{1}{t} \mathbb{P}(N_t = k) (1 - u^k) \end{aligned}$$

Mais puisque $0 \leq u \leq 1$,

$$0 \leq \sum_{k \geq 2} \frac{1}{t} \mathbb{P}(N_t = k)(1 - u^k) \leq \frac{1}{t} \mathbb{P}(N_t \geq 2)$$

et le résultat découle de la formule

$$\lambda(u) = \lim_{t \downarrow 0} \left[\frac{1}{t} \mathbb{P}(N_t = 1) \right] (1 - u),$$

à condition que l'on ait

$$\frac{1}{t} \mathbb{P}(N_t \geq 2) \rightarrow 0, \text{ quand } t \downarrow 0.$$

Or

$$\bigcup_{n \in \mathbb{N}} \{N_{nt} = 0, N_{(n+1)t} \geq 2\} \subset \{T_2 < T_1 + t\}$$

Comme $\mathbb{P}(N_t = 0) = f_t(0) = \exp(-\lambda(0)t)$, en utilisant en outre la propriété a) de la définition, on a :

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{N}} \exp(-\lambda(0)nt) \mathbb{P}(N_t \geq 2) &= [1 - \exp(-\lambda(0)t)]^{-1} \mathbb{P}(N_t \geq 2) \\ &\leq \mathbb{P}(T_2 < T_1 + t) \end{aligned}$$

Mais, quand $t \downarrow 0$,

$$P(T_2 < T_1 + t) \rightarrow P(T_2 \leq T_1) = 0$$

et pour tout t suffisamment petit,

$$(\lambda(0)t)^{-1} < (1 - \exp(-\lambda(0)t))^{-1} < 2(\lambda(0)t)^{-1}.$$

Remarque 6.2.4. *Il résulte de la dernière partie de la preuve ci-dessus que*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(N_{t+h} - N_t = 0) &= 1 - \lambda h + o(h) \\ \mathbb{P}(N_{t+h} - N_t = 1) &= \lambda h + o(h) \\ \mathbb{P}(N_{t+h} - N_t \geq 2) &= o(h) \end{aligned}$$

Donc à des probabilités petites devant h près, $N(t+h) - N(t)$ est une v.a. de Bernoulli prenant la valeur 0 avec la probabilité $1 - \lambda h$ et la valeur 1 avec

probabilité λh . Cette propriété, jointe à l'indépendance des accroissements et à la formule

$$N_{t+s} - N_t = \sum_{j=1}^n [N_{t+jh} - N_{t+(j-1)h}], \text{ avec } h = \frac{s}{n},$$

entraîne que $N_{t+s} - N_t$ suit approximativement une loi binomiale de paramètres $(n, \lambda s/n)$. Or, quand $n \rightarrow \infty$, cette loi converge vers la loi de Poisson de paramètre λs .

Notons que pour tout n , $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n$, la loi du vecteur aléatoire $(N_{t_1}, N_{t_2}, \dots, N_{t_n})$ est entièrement déterminée par la Proposition 6.2.2 et la condition a) de la définition 6.2.1.

Corollaire 6.2.5. *La loi de l'instant T_1 du premier événement est la loi exponentielle de paramètre λ (i.e. la loi sur \mathbb{R}_+ de densité $\lambda e^{-\lambda t}$). Il en est de même pour la loi du temps d'attente après s du premier événement après s , $T_{N_s+1} - s$, pour tout $s > 0$.*

PREUVE Il suffit de remarquer que pour tout $t > 0$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(T_1 > t) &= \mathbb{P}(N_t = 0) \\ &= e^{-\lambda t} \end{aligned}$$

et de même

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(T_{N_s+1} - s > t) &= \mathbb{P}(N_{s+t} - N_s = 0) \\ &= P(N_t = 0). \end{aligned}$$

6.3 Propriété de Markov

Soit $\{N_t, t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ . Pour tout $s, t > 0$, posons

$$N_t^s = N_{s+t} - N_s.$$

Il résulte immédiatement de la Définition 6.2.1 que $\{N_t^s, t \geq 0\}$ est un processus de Poisson d'intensité λ , indépendant de $\{N_t, 0 \leq t \leq s\}$. Remarquons que la donnée de $\{N_t, 0 \leq t \leq s\}$ est équivalente à celle de $(N_s, T_1, T_2, \dots, T_{N_s})$. L'indépendance dont il est question ci-dessus

est équivalente à celle de des vecteurs aléatoires $(N_s, T_1, T_2, \dots, T_{N_s})$ et $(T_{N_s+1}, T_{N_s+2}, \dots, T_{N_s+p})$, pour tout entier p .

Puisque les accroissements futurs après s $\{N_{s+t} - N_s, t \geq 0\}$ sont indépendants du passé $\{N_t, 0 \leq t \leq s\}$, il est clair que le futur après s $\{N_{s+t}, t \geq 0\}$ ne dépend du passé $\{N_t, 0 \leq t \leq s\}$ que par l'intermédiaire du présent N_s ; ou encore, le futur et le passé sont conditionnellement indépendants, sachant le présent. C'est la propriété de Markov.

Nous reviendrons sur cette propriété au chapitre suivant.

Nous allons maintenant généraliser le résultat ci-dessus au cas où s est un certain type de temps aléatoire. Pour cela, il nous faut tout d'abord rappeler une notation, et poser une définition.

Rappelons tout d'abord qu'une tribu de parties d'un ensemble \mathcal{E} est une classe de parties de \mathcal{E} stable par passage au complémentaire, réunion et intersection dénombrable. On peut toujours parler de "la plus petite tribu contenant une certaine classe $\mathcal{C} \subset \mathcal{P}(\mathcal{E})$ ", car c'est l'intersection de toutes les tribus contenant \mathcal{C} (il existe au moins une telle tribu, à savoir $\mathcal{P}(\mathcal{E})$, et une intersection quelconque de tribus est une tribu, comme cela se vérifie aisément). Par exemple, la tribu borélienne de \mathbb{R}^d , notée \mathcal{B}_d , est la plus petite tribu de parties de \mathbb{R}^d contenant tous les ouverts.

Dans le cas d'une variable aléatoire à valeurs dans un espace dénombrable E , $\sigma(X) = \{X^{-1}(F); F \subset E\}$. Etant donné un vecteur aléatoire X de dimension d (i.e. une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^d), on note $\sigma(X) = \{X^{-1}(B); B \in \mathcal{B}_d\}$ la plus petite sous tribu de parties de Ω qui rend X mesurable. C'est l'ensemble des événements dont on sait s'ils sont ou non réalisés au vu de la valeur prise par X . Etant donné $\{X_i, i \in I\}$ une collection quelconque de vecteurs aléatoires (de dimensions quelconques!), on note $\sigma\{X_i; i \in I\}$ la plus petite tribu contenant toutes les $\sigma(X_i), i \in I$.

Il sera commode d'utiliser dans la suite la notation suivante : pour $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_t^N &= \sigma\{N_s; 0 \leq s \leq t\} \\ &= \sigma\{N_t, T_1, T_2, \dots, T_{N_t}\}. \end{aligned}$$

Définition 6.3.1. *Etant donné un processus de Poisson $\{N_t, t \geq 0\}$, on appelle **temps d'arrêt** (de $\{N_t\}$) une v.a. S à valeurs dans $\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$ qui possède la propriété que pour tout t dans \mathbb{R}_+ ,*

$$\{S \leq t\} \in \mathcal{F}_t^N.$$

Pour tout s dans \mathbb{R}_+ , $S \equiv s$ est un temps d'arrêt. Pour tout n , T_n est un temps d'arrêt. T_{N_s+1} est également un temps d'arrêt. Par contre, T_{N_s} n'est pas un temps d'arrêt, car si $t < s$,

$$\{T_{N_s} \leq t\} = \{N_s - N_t = 0\} \notin \mathcal{F}_t^N, \quad 0 \leq t < s.$$

A tout temps d'arrêt S de $\{N_t\}$, on associe la tribu des événements "déterminés par la trajectoire $\{N_{t \wedge S}, t \geq 0\}$ arrêtée à S " :

$$\mathcal{F}_S^{N \text{ def}} = \{A \in \mathcal{F}_\infty^N; A \cap \{S \leq t\} \in \mathcal{F}_t^N, \forall t \geq 0\}.$$

On a la :

Proposition 6.3.2. *Soit $\{N_t, t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ , et S un temps d'arrêt de $\{N_t\}$. Sur l'événement $\{S < \infty\}$ on pose pour $t \geq 0$*

$$N_t^S = N_{S+t} - N_S.$$

Conditionnellement en $\{S < \infty\}$, $\{N_t^S, t \geq 0\}$ est un processus de Poisson d'intensité λ , indépendant de \mathcal{F}_S^N .

PREUVE On sait déjà que le résultat est vrai si S est constant. Supposons maintenant que S prend ses valeurs dans une suite croissante $(s_j, j \geq 1)$ de réels positifs. Notons que comme S est un temps d'arrêt,

$$\{S = s_j\} = \{S \leq s_j\} \setminus \{S \leq s_{j-1}\} \in \mathcal{F}_{s_j}^N$$

Soit $A \in \mathcal{F}_S^N$, $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_\ell$ et n_1, \dots, n_ℓ dans \mathbb{N} .

$$\begin{aligned} & \mathbb{P} \left(A \cap \left(\bigcap_{k=1}^{\ell} \{N_{t_k}^S = n_k\} \right) \right) \\ &= \sum_j \mathbb{P} \left(\{S = s_j\} \cap A \cap \left(\bigcap_{k=1}^{\ell} \{N_{s_j+t_k} - N_{s_j} = n_k\} \right) \right) \\ &= \sum_j \mathbb{P}(\{S = s_j\} \cap A) \mathbb{P} \left(\bigcap_{k=1}^{\ell} \{N_{s_j+t_k} - N_{s_j} = n_k\} \right) \\ &= \mathbb{P}(A) \mathbb{P} \left(\bigcap_{k=1}^{\ell} \{N_{t_k} = n_k\} \right), \end{aligned}$$

où on a utilisé la propriété $\{S = s_j\} \cap A \in \mathcal{F}_{s_j}^N$ pour la seconde égalité, et le fait que le second facteur de l'avant dernière expression ne dépend pas de s_j , par stationnarité des accroissements de $\{N_t\}$.

Le résultat est établi pour un temps d'arrêt prenant ses valeurs dans une suite croissante d'instant. Mais tout temps d'arrêt S peut être approché par une suite décroissante de temps d'arrêt de cette forme. En effet, pour tout n , posons

$$S_n = \sum_{k \in \mathbb{N}} k 2^{-n} \mathbf{1}_{\{(k-1)2^{-n} < S \leq k 2^{-n}\}}.$$

L'égalité ci-dessus est alors vraie avec S remplacé par S_n , puisque

$$S \leq S_n \Rightarrow \mathcal{F}_S^N \subset \mathcal{F}_{S_n}^N.$$

On passe aisément à la limite dans l'égalité avec S remplacé par S_n puisque par continuité à droite des trajectoires de $\{N_t, t \geq 0\}$,

$$\mathbb{P} \left(A \cap \left(\bigcap_{k=1}^{\ell} \{N_{t_k}^{S_n} = n_k\} \right) \right) \rightarrow \mathbb{P} \left(A \cap \left(\bigcap_{k=1}^{\ell} \{N_{t_k}^S = n_k\} \right) \right).$$

Corollaire 6.3.3. *Soit $\{N_t; t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ , et $(T_n)_{n \geq 1}$ ses instants de saut. On pose $S_1 = T_1, S_2 = T_2 - T_1, \dots, S_n = T_n - T_{n-1}, \dots$. Les variables aléatoires $S_1, S_2, \dots, S_n, \dots$ sont indépendantes, toutes de loi exponentielle de paramètre λ .*

PREUVE On sait déjà que T_1 , le premier instant de saut d'un processus de Poisson d'intensité λ , suit une loi exponentielle de paramètre λ . Il résulte de la Proposition 6.3.2 avec $S = T_n$ que $S_{n+1} = T_{n+1} - T_n$ est le premier instant de saut d'un processus de Poisson d'intensité λ donc suit une loi exponentielle de paramètre λ , et est indépendant de T_1, T_2, \dots, T_n , donc aussi de S_1, S_2, \dots, S_n . Ceci étant vrai pour tout $n \geq 1$, le résultat est démontré. \square

Il est assez clair que l'on a la réciproque suivante :

Proposition 6.3.4. *Soit $\{S_n; n \geq 1\}$ une suite de v.a.r. indépendantes, toutes de loi exponentielle de paramètre $\lambda > 0$. On pose*

$$T_n = S_1 + \dots + S_n, \quad n \geq 1,$$

$$N_t = \sup\{n; T_n \leq t\}, \quad t \geq 0.$$

Alors $\{N_t, t \geq 0\}$ est un processus de Poisson d'intensité λ .

On a donc une façon de “construire” un processus de Poisson, ce qui en particulier démontre que la Définition 6.2.1 n’est pas vide! On a aussi une façon de *simuler* le processus de Poisson.

6.4 Comportement asymptotique

Soit à nouveau $\{N_t; t \geq 0\}$ un processus de Poisson d’intensité λ . On a :

$$\mathbb{E}[N_t] = \lambda t, \quad \text{Var}[N_t] = \lambda t.$$

Donc $\mathbb{E}[N_t/t] = \lambda$, $\text{Var}[N_t/t] = \frac{\lambda}{t}$, d’où $N(t)/t \rightarrow \lambda$ en moyenne quadratique, quand $t \rightarrow \infty$. En fait on a aussi la “loi forte des grands nombres” :

Proposition 6.4.1. *Soit $\{N_t; t \geq 0\}$ un processus de Poisson d’intensité λ .*

Alors $\frac{N_t}{t} \rightarrow \lambda$ p.s. quand $t \rightarrow \infty$.

PREUVE Remarquons tout d’abord que

$$N_n = \sum_{1 \leq i \leq n} [N_i - N_{i-1}]$$

est la somme de n variables aléatoires indépendantes, de même loi de Poisson de paramètre λ (donc intégrable). Il résulte donc de la loi forte des grands nombres que

$$\frac{N_n}{n} \rightarrow \lambda, \quad \text{p.s., quand } n \rightarrow \infty.$$

Or, avec la notation $[t] =$ partie entière de t ,

$$\frac{N_t}{t} = \frac{N_{[t]}}{[t]} \times \frac{[t]}{t} + \frac{N_t - N_{[t]}}{t}.$$

Il suffit donc de montrer que

$$\sup_{n < t < n+1} \frac{N_t - N_n}{n} \rightarrow 0, \quad \text{quand } n \rightarrow \infty.$$

Or si

$$\begin{aligned} \xi_n &\stackrel{\text{def}}{=} \sup_{n < t < n+1} N_t - N_n, \\ &= N_{n+1} - N_n, \end{aligned}$$

les $\{\xi_n\}$ sont i.i.d. et intégrables. Donc $\frac{\xi_1 + \dots + \xi_n}{n} \rightarrow \lambda$ p.s., d'où

$$\frac{\xi_n}{n} \rightarrow 0 \text{ p.s.}$$

□

On a un "théorème de la limite centrale" :

Proposition 6.4.2. *Soit $\{N_t; t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ . Alors*

$$\frac{N_t - \lambda t}{\sqrt{\lambda t}} \rightarrow Z \text{ en loi, quand } t \rightarrow \infty,$$

où Z est une v.a.r de loi gaussienne centrée réduite (i.e. d'espérance 0 et de variance 1).

PREUVE On raisonne comme dans la preuve précédente.

$$\frac{N_n - \lambda n}{\sqrt{\lambda n}} \rightarrow Z \text{ en loi, quand } n \rightarrow \infty,$$

d'après le théorème de la limite centrale "classique". Et

$$\frac{N_t - N_{[t]}}{\sqrt{\lambda[t]}} \leq \xi_{[t]}/\sqrt{\lambda[t]},$$

qui tend en probabilité vers zéro quand $t \rightarrow \infty$ puisque

$$\begin{aligned} P\left(\xi_n/\sqrt{\lambda n} > \varepsilon\right) &= P\left(\xi_n > \varepsilon\sqrt{\lambda n}\right) \\ &= P\left(\xi_1 > \varepsilon\sqrt{\lambda n}\right) \\ &\rightarrow 0, \text{ quand } n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Donc a fortiori $\frac{N_t - N_{[t]}}{\sqrt{\lambda[t]}} \rightarrow 0$ en probabilité quand $t \rightarrow \infty$. Finalement :

$$\begin{aligned} \frac{N_t - \lambda t}{\sqrt{\lambda t}} &= \frac{N_{[t]} - \lambda[t]}{\sqrt{\lambda[t]}} \times \sqrt{\frac{[t]}{t}} \\ &\quad + \frac{N_t - N_{[t]}}{\sqrt{\lambda t}} \times \sqrt{\frac{[t]}{t}} + \sqrt{\lambda} \frac{[t] - t}{\sqrt{t}}, \end{aligned}$$

et on sait que si $X_n \rightarrow X$ en loi, $Y_n \rightarrow 0$ en probabilité, alors

$$X_n + Y_n \rightarrow X \text{ en loi.}$$

□

On peut en fait établir un “théorème de la limite centrale fonctionnel” que nous allons maintenant décrire. Une démonstration analogue à celle de la Proposition 6.4.2 montre que pour tout $t > 0$,

$$\frac{N_{tu} - \lambda tu}{\sqrt{\lambda u}} \rightarrow B_t \text{ en loi quand } u \rightarrow \infty,$$

où B_t est une v.a.r. gaussienne centrée de variance t . Remarquons que pour chaque u , $\{[N_{tu} - \lambda tu]/\sqrt{\lambda u}, t \geq 0\}$ est un processus à accroissements indépendants, dont les sauts sont d’amplitude $(\lambda u)^{-1/2}$. Il en résulte que l’on peut passer à la limite ci-dessus quand $u \rightarrow \infty$ “de façon coordonnée pour les différents t ”, de telle sorte que la limite $\{B_t, t \geq 0\}$ soit un processus gaussien centré, à accroissements indépendants, à trajectoires continues, et vérifiant $E[B_t] = t$. $\{B_t; t \geq 0\}$ est ce qu’on appelle le **mouvement brownien**.

6.5 Exercices

Exercice 6.5.1. Soit X une v.a.r. à valeurs dans \mathbb{R}_+ t.q. $\mathbb{P}(X > t) > 0, \forall t > 0$. On suppose en outre que $\forall s, t > 0$,

$$\mathbb{P}(X > s + t | X > t) = \mathbb{P}(X > s).$$

En déduire que la loi de X est une loi exponentielle.

Exercice 6.5.2. Trois personnes A, B et C arrivent à la poste en même temps pour téléphoner. Il y a deux cabines qu’occupent immédiatement A et B . C remplace le premier sorti. A, B et C quittent immédiatement la poste après avoir téléphoné.

On désigne par X, Y et Z les temps d’occupation de la cabine par A, B et C respectivement. Ces trois variables aléatoires sont supposées indépendantes et équidistribuées, de loi commune la loi sur \mathbb{R}_+ de densité $\lambda \exp(-\lambda t), t \geq 0$ (avec $\lambda > 0$).

a Calculer la probabilité que C sorte le dernier.

- b** Trouver la loi de probabilité du temps total T passé par C à la poste.
c L'instant 0 étant l'instant d'arrivée des trois personnes à la poste, donner la loi de probabilité de l'instant du dernier départ.

Indication : on cherchera à déterminer la loi du v.a. $(X \wedge Y, X \vee Y - X \wedge Y)$ ($\wedge = \inf$, $\vee = \sup$).

Exercice 6.5.3. Une machine possède une durée de vie τ_1 de loi exponentielle de paramètre θ . Lorsqu'elle tombe en panne, elle est instantanément remplacée par une machine semblable de durée de vie τ_2 et ainsi de suite. On suppose les durées de vie $(\tau_n; n \in \mathbb{N})$ indépendantes et équidistribuées. La première machine commence à travailler à l'instant 0; les instants T_n ($n \geq 1$) de défaillance des machines successives (soit $T_1 = \tau_1, T_2 = \tau_1 + \tau_2, \dots$) forment un processus de Poisson.

- a** Pour un instant $t > 0$ fixé, soit D_t la durée écoulée depuis la mise en fonctionnement de la machine en marche à l'instant t . Dans quel ensemble la v.a. D_t prend-elle ses valeurs? Quelle est la loi de D_t ? Montrer que lorsque $t \rightarrow \infty$, cette loi possède une limite.
b Soit S_t la v.a. positive telle que $t + S_t$ soit l'instant de défaillance de la machine en fonctionnement à l'instant t . Quelle est la loi de S_t ? Quelle est la loi du couple (D_t, S_t) et quelle est la limite de cette loi lorsque $t \rightarrow \infty$? Pourquoi les deux v.a. D_t et S_t ne sont-elles pas équidistribuées et pourquoi le deviennent-elles quand $t \rightarrow \infty$?
c Quelle est la loi de $D_t + S_t$, la durée de vie de la machine en fonctionnement à l'instant t ? Comparer la limite de cette loi quand $t \rightarrow \infty$ avec la loi commune des τ_n .

Exercice 6.5.4. **a)** Soit X_1, X_2, \dots, X_n des v.a.r. indépendantes, toutes de loi uniforme sur $[0, t]$, et Y_1, Y_2, \dots, Y_n la même suite ordonnée par ordre croissant, i.e. définie par

$$Y_1 = \inf_{1 \leq i \leq n} X_i = X_{i_1}$$

$$Y_2 = \inf_{1 \leq i \leq n, i \neq i_1} X_i$$

et ainsi de suite. Préciser la loi du vecteur aléatoire (Y_1, Y_2, \dots, Y_n) .

- b)** Soit $\{N_t, t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ . Montrer que la loi conditionnelle du vecteur aléatoire (T_1, T_2, \dots, T_n) , sachant que $N_t = n$, est la loi trouvée en a).

Exercice 6.5.5. Soit $\{N_t^1; t \geq 0\}$ et $\{N_t^2; t \geq 0\}$ deux processus de Poisson indépendants, d'intensité respective λ_1 et λ_2 . Montrer que $\{N_t^1 + N_t^2; t \geq 0\}$ est un processus de Poisson d'intensité $\lambda_1 + \lambda_2$.

Exercice 6.5.6. On admet que la population des individus infectés par le virus VIH croît selon un processus de Poisson d'intensité inconnue λ . On notera N_t le nombre d'individus infectés à l'instant t . On ne prendra pas en compte les décès.

Chaque individu infecté subit une période d'incubation entre le moment où il est infecté par le VIH et le moment où les symptômes du SIDA apparaissent. La durée de cette période d'incubation est aléatoire. Les périodes d'incubation pour les différents individus sont i. i. d., de loi commune la loi sur \mathbb{R}_+ de fonction de répartition connue G . On notera \bar{G} la fonction $\bar{G}(t) = 1 - G(t)$.

On note N_t^1 le nombre d'individus qui à l'instant t présentent les symptômes du SIDA, N_t^2 le nombre d'individus qui à l'instant t sont infectés par le VIH, mais ne présentent pas encore les symptômes du SIDA. On a bien sûr

$$N_t = N_t^1 + N_t^2,$$

et on demande de montrer que pour tout $t > 0$, N_t^1 et N_t^2 sont deux v. a. indépendantes, N_t^1 de loi de Poisson de paramètre $\lambda \int_0^t G(s) ds$, et N_t^2 de loi de Poisson de paramètre $\lambda \int_0^t \bar{G}(s) ds$.

Exercice 6.5.7. Programmation On appelle taux de panne d'une v. a. X à densité à valeurs dans \mathbb{R}_+ la fonction λ de \mathbb{R}_+ dans \mathbb{R}_+ définie par

$$\lambda(t) = \frac{f(t)}{1 - F(t)},$$

où f désigne la densité de la loi de X , F sa fonction de répartition. L'exercice 6.5.1 dit que la loi exponentielle est la seule à avoir un taux de panne constant.

On appelle loi de Weibull de paramètres $\lambda, \alpha > 0$ la loi de fonction de survie

$$\bar{F}(t) = e^{-(\lambda t)^\alpha},$$

et de taux de panne

$$\lambda(t) = \alpha \lambda (\lambda t)^{\alpha-1}.$$

La loi de Weibull a un taux de panne croissant si $\alpha > 1$ et décroissant si $\alpha < 1$. On retrouve la loi exponentielle de paramètre λ dans le cas $\alpha = 1$.

On appelle loi $\Gamma(\alpha, \lambda)$ la loi de probabilités sur \mathbb{R}_+ de densité

$$f(t) = \frac{\lambda}{\Gamma(\alpha)} e^{-\lambda t} (\lambda t)^{\alpha-1},$$

où $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-1} dt$.

A nouveau la loi Gamma a un taux de panne croissant si $\alpha > 1$ et décroissant si $\alpha < 1$. Notons que si l'on additionne n v. a. indépendantes, toutes exponentielles de même paramètre λ , on obtient une v. a. de loi $\Gamma(n, \lambda)$ à taux de panne croissant.

Supposons que deux machines travaillent en parallèle, et ont besoin pour leur fonctionnement d'une pièce M quelque peu fragile. On dispose d'une seule pièce de rechange, qui est placée instantanément sur la machine dont la pièce M tombe en panne la première. Les trois pièces M (les deux en place au début, et celle de rechange) ont des temps de vie i. i. d. La deuxième panne est fatale à la machine qui la subit. Si les temps de vie de ces pièces suivent une loi exponentielle, alors l'exercice 6.5.2 montre que les deux machines ont même probabilité de subir la deuxième panne.

On peut supposer que si l'on remplace la loi exponentielle par une loi à taux de panne croissant, la machine qui a vu sa pièce remplacée a plus de chance de vivre plus longtemps que l'autre, et que c'est l'inverse dans le cas d'une loi à taux de panne décroissant.

On demande d'illustrer à l'aide de tirages aléatoires le résultat de l'exercice 6.5.2, et les deux conjectures que nous avons formulées.

Successivement pour \mathbb{P} = la loi exponentielle de paramètre 1, la loi $\Gamma(3, 1)$, la loi de Weibull de paramètres $(1, 0.5)$ (que l'on simule aisément en inversant sa fonction de répartition), on simule une matrice $3 \times N$ de v. a. indépendantes de loi \mathbb{P} , notée X . On trace alors, en fonction de n variant de 1 à N , et sur le même graphique les trois quantités

$$n^{-1} \sum_{k=1}^n \{ \min[X(1, k), X(2, k)] + X(3, k) - \max[X(1, k), X(2, k)] \}.$$

On pourra choisir $N = 10^3$ ou $N = 10^4$.

Chapitre 7

Processus markoviens de saut

Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'essentiel de la théorie des processus de Markov en temps continu, à valeurs dans un ensemble fini ou dénombrable E . Comme on le verra à la section 7.4, ces processus sont en quelque sorte une combinaison d'un processus de Poisson et d'une chaîne de Markov en temps discret (la "chaîne incluse"). Dans une seconde partie de ce chapitre, nous présenterons des applications à la phylogénie, aux équations aux dérivées partielles discrétisées, et à l'algorithme du recuit simulé. La preuve de la convergence de l'algorithme du recuit présentée ici est due à Francis Comets (communication privée). Les files d'attente seront traitées au chapitre suivant.

7.1 Généralités

Le but de ce chapitre est d'étudier les processus de Markov à valeurs dans un espace d'état E fini ou dénombrable. On supposera que les trajectoires de nos processus n'ont que des discontinuités de première espèce (des sauts), et pour fixer les idées que les trajectoires sont continues à droite et pourvues de limite à gauche en tout point. Les trajectoires d'un tel processus $\{X_t, t \geq 0\}$ sont nécessairement constantes entre ses sauts, lesquels se produisent à des instants aléatoires $T_1(\omega), T_2(\omega), \dots, T_n(\omega), \dots$. La différence avec le processus de Poisson du chapitre précédent est que, connaissant la position avant le saut, la position après le saut est aléatoire. Si l'on désigne par $Z_n(\omega)$ la

position de $\{X_t\}$ juste après la n -ième saut $T_n(\omega)$, $n \geq 1$, une trajectoire type de $\{X_t; t \geq 0\}$ est dessinée à la figure 7.1.

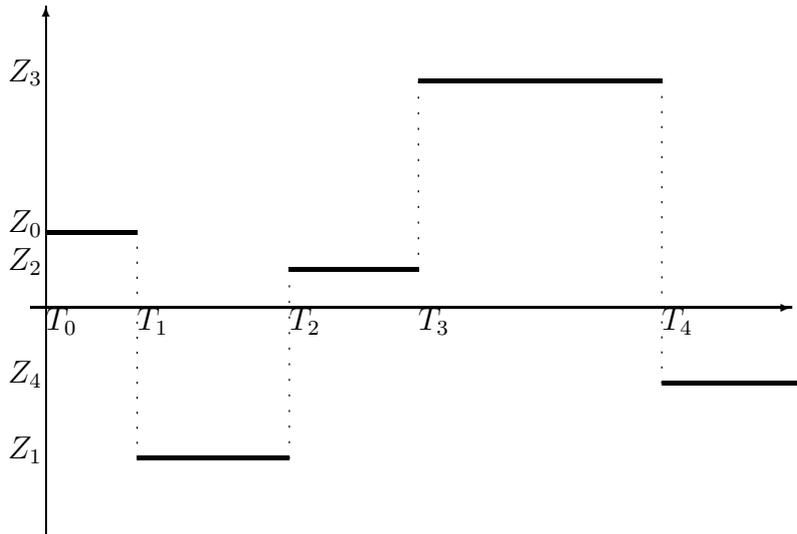


FIG. 7.1 – Trajectoire d'un processus markovien de sauts

La donnée de $\{X_t; t \geq 0\}$ est équivalente à celle de la double suite $\{T_n, Z_n; n \geq 0\}$.

Pour certaines applications, il convient de pouvoir rendre certains états absorbants (par exemple, dans le cas d'un modèle décrivant l'évolution de la taille d'une population sans possibilité d'immigration, l'état 0 est absorbant). $x \in E$ est dit absorbant si $X_{T_n}(\omega) = x \Rightarrow T_{n+1}(\omega) = +\infty$.

On supposera donc que les instants de saut forment une suite croissante

$$0 = T_0 \leq T_1 \leq T_2 \leq \dots \leq T_n \leq \dots$$

avec $T_n \in \mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$, et

$$T_n(\omega) < T_{n+1}(\omega) \text{ si } T_n(\omega) < \infty,$$

et en outre qu'il n'y a pas d'explosion, i. e. que les instants de saut ne s'accumulent pas à distance finie, autrement dit que

$$T_n(\omega) \rightarrow +\infty \text{ p. s., quand } n \rightarrow \infty. \quad (7.1)$$

Une fonction aléatoire $\{X_t; t \geq 0\}$ à valeurs dans E est appelée fonction aléatoire de sauts si elle est de la forme :

$$X_t(\omega) = \sum_{\{n \geq 0; T_n(\omega) < \infty\}} Z_n(\omega) \mathbf{1}_{[T_n(\omega), T_{n+1}(\omega)[}(t)$$

où les v.a. Z_n prennent leurs valeurs dans E . Posons la :

Définition 7.1.1. Une fonction aléatoire de sauts $\{X_t, t \geq 0\}$ à valeurs dans E est appelée **processus markovien de sauts** (ou chaîne de Markov en temps continu) si pour tout $0 < s < t$, la loi conditionnelle de la v.a. X_t sachant $\{X_u; 0 \leq u \leq s\}$ ne dépend que de X_s , i.e. si pour tout $n \in \mathbb{N}$, $0 \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n < s$, $x_0, x_1, \dots, x_n, x, y \in E$,

$$\mathbb{P}(X_t = y | X_{t_0} = x_0, X_{t_1} = x_1, \dots, X_{t_n} = x_n, X_s = x) = \mathbb{P}(X_t = y | X_s = x)^1.$$

On dira que le processus markovien $\{X_t, t \geq 0\}$ est **homogène** si la quantité $P(X_t = y | X_s = x)$ ne dépend de s et de t que par la différence $t - s$.

On n'étudiera dans la suite que des processus markoviens homogènes. On utilisera la notation :

$$\mathbb{P}(X_t = y | X_s = x) = P_{xy}(t - s)$$

où pour tout $t > 0$, $P(t)$ est une "matrice markovienne" sur $E \times E$, appelée matrice de transition dans le temps t . On notera ci-dessous $\mu(t)$ la loi de probabilité de X_t sur E , $t \geq 0$. $\mu(0)$ est appelée la "loi initiale" du processus $\{X_t; t \geq 0\}$.

Proposition 7.1.2. Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts, de loi initiale μ et de matrices de transition $\{P(t), t > 0\}$. Pour tout n dans \mathbb{N} , $0 < t_1 < \dots < t_n$, la loi du vecteur aléatoire $(X_0, X_{t_1}, \dots, X_{t_n})$ est donnée par : pour tout x_0, x_1, \dots, x_n dans E ,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(X_0 = x_0, X_{t_1} = x_1, X_{t_2} = x_2, \dots, X_{t_n} = x_n) \\ & = \mu_{x_0} P_{x_0 x_1}(t_1) P_{x_1 x_2}(t_2 - t_1) \times \dots \times P_{x_{n-1} x_n}(t_n - t_{n-1}). \end{aligned}$$

¹Cette condition n'a de sens que si

$$\mathbb{P}(X(t_0) = x_0, X(t_1) = x_1, \dots, X(t_n) = x_n, X(s) = x) > 0.$$

On ne tiendra pas compte de la condition pour les valeurs de $n, x_0, x_1, \dots, x_n, x$ pour lesquelles cette inégalité n'est pas satisfaite

Par conséquent, pour tout $t > 0$,

$$\mu(t) = \mu(0)P(t)$$

au sens où $\mu_y(t) = \sum_{x \in E} \mu_x(0)P_{xy}(t)$, et pour toute fonction positive ou bornée $g : E \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[g(X_t)|X_0 = x] &= (P(t)g)_x \\ &= \sum_{y \in E} P_{xy}(t)g_y. \end{aligned}$$

En outre, les matrices de transition $\{P(t), t > 0\}$ vérifient la relation de semi-groupe (équation de Chapman–Kolmogorov) :

$$P(s+t) = P(s)P(t),$$

au sens où pour tous les x, y dans E

$$P_{xy}(t+s) = \sum_{z \in E} P_{xz}(t)P_{zy}(s)$$

PREUVE Il résulte immédiatement de la définition des probabilités conditionnelles et de la propriété de Markov que

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_{t_1} = x_1, \dots, X_{t_n} = x_n) \\ &= \mathbb{P}(X_0 = x_0)P(X_{t_1} = x_1|X_0 = x_0)\mathbb{P}(X_{t_2} = x_2|X_0 = x_0, X_{t_1} = x_1) \\ &\times \dots \times \mathbb{P}(X_{t_n} = x_n|X_0 = x_0, X_{t_1} = x_1, \dots, X_{t_{n-1}} = x_{n-1}) \\ &= \mu_{x_0}P_{x_0x_1}(t_1)P_{x_1x_2}(t_2 - t_1) \times \dots \times P_{x_{n-1}x_n}(t_n - t_{n-1}). \end{aligned}$$

Dans le cas $n = 1$, cette formule s'écrit :

$$\mathbb{P}(X_0 = x, X_t = y) = \mu_x P_{xy}(t)$$

et le second résultat s'en déduit en sommant sur $x \in E$. Par définition de $P(t)$,

$$\mathbb{P}(X_t = y|X_0 = x) = P_{xy}(t),$$

le troisième résultat s'en déduit en multipliant par g_y et sommant en $y \in E$.

Enfin la formule ci-dessus dans le cas $n = 2$ donne, après division par μ_{x_0}

$$\mathbb{P}(X_s = k, X_{s+t} = y|X_0 = x) = P_{xz}(s)P_{zy}(t)$$

le dernier résultat s'en déduit en sommant en $z \in E$. \square

Nous allons maintenant présenter quelques exemples de processus markoviens de saut.

Exemple 7.1.3. *Un processus de Poisson $\{N_t; t \geq 0\}$ d'intensité λ est un processus de Markov à valeurs dans \mathbb{N} , de matrice de transition :*

$$P_{xy}(t) = \begin{cases} e^{-\lambda t} (\lambda t)^{y-x} / (y-x)!, & \text{si } y \geq x; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Exemple 7.1.4. Processus du télégraphe *Etant donné un processus de Poisson $\{N_t\}$ d'intensité λ , et une v.a. X_0 à valeur dans $E = \{-1, +1\}$, indépendante de $\{N_t; t \geq 0\}$, on pose :*

$$X_t = X_0(-1)^{N_t}, \quad t \geq 0.$$

$\{X_t, t \geq 0\}$ est un processus de Markov, de matrice de transition :

$$P_{+1+1}(t) = P_{-1-1}(t) = e^{-\lambda t} \sum_{n \geq 0} \frac{(\lambda t)^{2n}}{(2n)!}$$

$$P_{-1+1}(t) = P_{+1-1}(t) = e^{-\lambda t} \sum_{n \geq 0} \frac{(\lambda t)^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

Exemple 7.1.5. *Soit $\{N_t; t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ , et d'instant de saut $0 < T_1 < T_2 < T_3 < \dots < T_n < \dots$. On se donne en outre une chaîne de Markov en temps discret $\{Z_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans E , de matrice de transition $\{P_{xy}; x, y \in E\}$, indépendante de $\{N_t, t \geq 0\}$. Alors on peut montrer (voir exercice 7.11.1 ci-dessous) que*

$$X_t = \sum_{n=0}^{\infty} Z_n \mathbf{1}_{[T_n, T_{n+1}[}(t), \quad t \geq 0$$

est un processus markovien de saut.

7.2 Générateur infinitésimal

La propriété de semi-groupe fait que $P(t)$ est connu pour tout t dès qu'il est connu pour t petit. En fait, on va voir qu'il est entièrement déterminé par sa dérivée à droite en $t = 0$ (on sait que $P(0) = I$).

Théorème 7.2.1. *Soit $\{P(t), t > 0\}$ le semi-groupe des matrices de transition d'un processus markovien de sauts $\{X_t, t \geq 0\}$.*

*Il existe une matrice $\{Q_{xy}; x, y \in E\}$ (appelée le **générateur infinitésimal** du semi-groupe $\{P(t); t \geq 0\}$ qui vérifie*

$$(i) \quad Q_{xy} \geq 0 \text{ si } x \neq y$$

$$(ii) \quad Q_{xx} = - \sum_{y \in E \setminus \{x\}} Q_{xy} \leq 0,$$

(cette dernière égalité étant stricte sauf si l'état x est absorbant) et telle que, lorsque $h \downarrow 0$,

$$P_{xy}(h) = hQ_{xy} + o(h) \text{ si } x \neq y$$

$$P_{xx}(h) = 1 + hQ_{xx} + o(h).$$

En outre, conditionnellement en $X_0 = x$, l'instant de premier saut T_1 et la position après le premier saut $Z_1 = X_{T_1}$ sont indépendants, T_1 de loi exponentielle de paramètre $q_x = -Q_{xx}$, et Z_1 de loi sur E donnée par $\{Q_{xy}/q_x; y \neq x\}$.

PREUVE Remarquons tout d'abord que

$$\{T_1 > nh\} \subset \{X_0 = X_h = \dots = X_{nh}\} \subset \{T_1 > nh\} \cup \{T_2 - T_1 \leq h\}.$$

Comme $P(T_2 - T_1 \leq h) \rightarrow 0$ quand $h \rightarrow 0$, on a que si, $h \rightarrow 0$, $nh \rightarrow t$ (avec $nh \geq t$),

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(T_1 > t | X_0 = x) &= \lim \mathbb{P}(X_0 = X_h = \dots = X_{nh} | X_0 = x) \\ &= \lim [P_{xx}(h)]^n \end{aligned}$$

L'existence de cette dernière limite entraîne que

$$\frac{1}{h} [1 - P_{xx}(h)] \rightarrow q_x \in [0, +\infty],$$

quand $h \rightarrow 0$, et donc

$$\mathbb{P}(T_1 > t | X_0 = x) = e^{-q_x t}.$$

D'où nécessairement $q_x < \infty$ et $q_x = 0$ ssi x est absorbant. On pose $Q_{xx} = -q_x$.

La démonstration de l'existence des limites de $\frac{1}{h}P_{xy}(h)$ pour $x \neq y$ se fait de façon analogue :

$$\begin{aligned} & \{T_1 \leq t, Z_0 = x, Z_1 = y\} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0, nh \rightarrow t} \cup_{1 \leq m \leq n} \{X_0 = X_h = \dots = X_{(m-1)h} = x, X_{mh} = y\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(T_1 \leq t, Z_1 = y | X_0 = x) &= \lim \frac{1 - P_{xx}(h)^n}{1 - P_{xx}(h)} P_{xy}(h) \\ &= \frac{1 - e^{-q_x t}}{q_x} \lim \frac{1}{h} P_{xy}(h) \end{aligned}$$

Donc $Q_{xy} = \lim \frac{1}{h} P_{xy}(h)$ existe pour $x \neq y$ et

$$\mathbb{P}(T_1 \leq t, Z_1 = y | X_0 = x) = (1 - e^{-q_x t}) \frac{Q_{xy}}{q_x}$$

d'où

$$\mathbb{P}(T_1 \leq t, Z_1 = y | X_0 = x) = \mathbb{P}(T_1 \leq t | X_0 = x) \mathbb{P}(Z_1 = y | X_0 = x)$$

et

$$\mathbb{P}(Z_1 = y | X_0 = x) = \frac{Q_{xy}}{q_x}.$$

Dans le cas $\text{card}E < \infty$, on déduit immédiatement du Théorème le :

Corollaire 7.2.2. (i) $\{P(t), t \geq 0\}$ est l'unique solution de l'équation de Kolmogorov "rétrograde"

$$\frac{dP}{dt}(t) = QP(t) \quad t > 0; \quad P(0) = I.$$

En outre $u(t, x) := E[g(X_t) | X_0 = x]$ satisfait aussi une équation de Kolmogorov rétrograde

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \sum_{y \in E} Q_{xy} u(t, y), & t > 0, x \in E; \\ u(0, x) = g(x), & x \in E. \end{cases}$$

(ii) $\{P(t), t \geq 0\}$ est aussi l'unique solution de l'équation de Kolmogorov progressive :

$$\frac{dP(t)}{dt} = P(t)Q, \quad t > 0; \quad P(0) = I.$$

En outre, la famille des lois de probabilité marginales $\{\mu(t), t \geq 0\}$ des v.a. $\{X_t; t \geq 0\}$ satisfait l'équation de Fokker–Planck :

$$\frac{\partial \mu_x(t)}{\partial t} = \sum_{y \in E} \mu_y(t) Q_{yx}, \quad t > 0, x \in E.$$

PREUVE Pour établir l'équation de Kolmogorov rétrograde, il suffit de dériver $P_{xy}(t)$ en utilisant la propriété de semi-groupe sous la forme

$$P(t+h) = P(h)P(t).$$

L'équation pour u se déduit alors de l'équation obtenue en multipliant à droite par le vecteur colonne $\{g_x\}$.

L'équation progressive s'obtient en dérivant à partir de la formule :

$$P(t+h) = P(t)P(h).$$

L'équation de Fokker–Planck s'en déduit alors en multipliant à gauche par le vecteur ligne $\{\mu(0)\}$.

Remarque 7.2.3. Essayons d'expliquer la terminologie “équation progressive, équation rétrograde” (en Anglais “forward, backward equation”). L'équation rétrograde est une équation pour la fonction $(t, x) \rightarrow P_{xy}(t)$, à $y \in E$ fixé. C'est une équation en la variable t et en la variable “rétrograde” x . x désigne la position à l'instant initial, c'est la position dans le passé. Au contraire, l'équation progressive est une équation pour la fonction $(t, y) \rightarrow P_{xy}(t)$, à $x \in E$ fixé. La variable y désigne la position de la chaîne à l'instant t , c'est la position à l'instant présent.

Considérons maintenant l'équation rétrograde pour $u(t, x) = \mathbb{E}[g(X_t)|X_0 = x]$, choisissons $T > 0$, et posons pour $0 \leq t \leq T$, $v(t, x) = u(T - t, x) = \mathbb{E}[g(X_T)|X_t = x]$. v satisfait l'équation

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \sum_{y \in E} Q_{xy} u(t, y) = 0, & t > 0, x \in E; \\ v(T, x) = g(x), & x \in E. \end{cases}$$

L'équation pour v est une équation rétrograde au sens où elle se résout dans le sens négatif du temps, de $t = T$ vers $t = 0$. Notons que dans le cas non-homogène, où le générateur infinitésimal Q dépend de t , la quantité $v(t, x) = \mathbb{E}[g(X_T)|X_t = x]$ est bien solution de cette même équation, alors que l'on n'a plus l'équation pour u .

La démonstration ci-dessus n'est pas rigoureuse dans le cas $\text{card}E = \infty$, puisqu'elle implique la permutation d'une dérivation et d'une sommation infinie. Nous établirons l'équation de Kolmogorov "rétrograde" dans le cas général dans la section suivante.

7.3 Propriété de Markov forte

La notion de temps d'arrêt et la tribu \mathcal{F}_S^X sont définis comme à la section 6.3, en remplaçant $\{N_t; t \geq 0\}$ par $\{X_t; t \geq 0\}$.

Théorème 7.3.1. *Soit S un temps d'arrêt du processus markovien de sauts $\{X_t; t \geq 0\}$. Conditionnellement en $\{S < \infty\}$ et $\{X_S = x\}$, $\{X_{S+t}, t \geq 0\}$ est indépendant de \mathcal{F}_S^X , et sa loi est celle de $\{X_t; t \geq 0\}$ sachant que $X_0 = x$.*

PREUVE On va se contenter de faire la démonstration dans le cas d'un temps d'arrêt constant $S \equiv s$. Le cas général s'en déduit comme pour le processus de Poisson (cf. Preuve de la Proposition 6.3.2). Soit $0 \leq s_1 < s_2 < \dots < s_k < s$; $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_\ell$; $x, x_1, \dots, x_z, y_1, \dots, y_\ell \in S$,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(X_{s+t_1} = y_1, \dots, X_{s+t_\ell} = y_\ell | X_{s_1} = x_1, \dots, X_{s_k} = x_k, X_s = x) \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_{s_1} = x_1, \dots, X_{s_k} = x_k, X_s = x, X_{s+t_1} = y_1, \dots, X_{s+t_\ell} = y_\ell)}{\mathbb{P}(X_{s_1} = x_1, \dots, X_{s_k} = x_k, X_s = x)} \\ &= P_{xy_1}(t_1) P_{y_1 y_2}(t_2 - t_1) \times \dots \times P_{y_{\ell-1} y_\ell}(t_\ell - t_{\ell-1}) \\ &= \mathbb{P}(X_{t_1} = y_1, \dots, X_{t_\ell} = y_\ell | X_0 = x) \end{aligned}$$

□

Nous allons maintenant établir l'équation de Kolmogorov rétrograde dans le cas général.

Théorème 7.3.2. *Pour tout $x, y \in E$, la fonction $t \rightarrow P_{xy}(t)$ est dérivable, et*

$$\frac{d}{dt}P_{xy}(t) = (QP)_{xy}(t).$$

PREUVE Définissons pour tout $n \in \mathbb{N}$ la loi conditionnelle de (Z_n, T_n) sachant que $X_0 = Z_0 = x$:

$$R_n(x; y, B) = \mathbb{P}(Z_n = y, T_n \in B | Z_0 = x), \quad B \text{ borélien de } \mathbb{R}_+.$$

Notons que

$$R_0(x; y, B) = \begin{cases} 1, & \text{si } x = y, 0 \in B; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

et qu'il résulte du Théorème 7.2.1 que

$$R_1(x; y, B) = \begin{cases} Q_{xy} \int_B e^{-q_x t} dt, & \text{si } x \neq y; \\ 0, & \text{si } x = y. \end{cases}$$

La propriété de Markov forte à l'instant T_m entraîne que

$$\mathbb{P}(Z_{m+n} = z, T_{m+n} \in B | \mathcal{F}_{T_m}^X) = R_n(X_{T_m}; z, B - T_m),$$

où nous avons utilisé la notation

$$B - t = \{s \in \mathbb{R}_+; s + t \in B\}$$

Donc

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Z_{m+n} = z, T_{m+n} \in B | X_0 = x) &= \mathbb{E}[R_n(Z_m; z, B - T_m) | X_0 = x] \\ &= \sum_{y \in E} \int_{\mathbb{R}_+} R_m(x; y, dt) R_n(y; z, B - t), \end{aligned}$$

Autrement dit,

$$R_{m+n}(x; z, B) = \sum_{y \in E} \int_B \int_{\mathbb{R}_+} R_m(x; y, dt) R_n(y; z, du - t),$$

soit

$$R_{m+n}(x; z, du) = \sum_y \int_0^u R_m(x; y, dt) R_n(y; z, du - t),$$

où la mesure $R_n(y; z, du - t)$ est définie par

$$\int_{\mathbf{R}_+} R_m(y; z, du - t) f(u) = \int_{\mathbf{R}_+} R_m(y; z, du) f(t + u).$$

Il est clair que les $\{R_n, n \geq 1\}$ sont entièrement déterminés par R_1 et cette équation fondamentale.

Remarquons que

$$\begin{aligned} P_{xy}(s) &= \sum_{m \geq 0} \mathbb{P}(Z_m = y, T_m \leq s < T_{m+1} | Z_0 = x) \\ &= \sum_{m \geq 0} P(Z_m = y, T_m \leq s, T_{m+1} - T_m > s - T_m | Z_0 = x) \\ &= \sum_{m \geq 0} \mathbb{E}[\mathbb{P}(T_{m+1} - T_m > s - T_m | Z_m, T_m) \mathbf{1}_{\{Z_m = y, T_m \leq s\}} | Z_0 = x] \\ &= \sum_{m \geq 0} \mathbb{E}[e^{-qZ_m(s-T_m)} \mathbf{1}_{\{Z_m = y, T_m \leq s\}} | Z_0 = x] \\ &= \sum_{m \geq 0} \int_0^s e^{-qy(s-t)} R_m(x; y, dt), \end{aligned}$$

où on a utilisé à la troisième égalité la propriété de Markov forte à l'instant T_m .

Donc d'après l'équation ci-dessus

$$\begin{aligned} P_{xy}(s) &= \delta_{xy} e^{-qxs} + \sum_{m \geq 1} \int_0^s e^{-qy(s-t)} R_m(x; y, dt) \\ P_{xy}(s) &= \delta_{xy} e^{-qxs} + \sum_{m \geq 0, z \in E} \int_0^s e^{-qy(s-t)} \int_0^t R_1(x; z, du) R_m(z; y, dt - u), \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} P_{xy}(t) &= \delta_{xy} e^{-qxt} + \sum_{z \in E} \int_0^t R_1(x; z, ds) P_{zy}(t - s) \\ e^{qxt} P_{xy}(t) &= \delta_{xy} + \int_0^t e^{qxs} \sum_{z \neq x} Q_{xz} P_{zy}(s) ds. \end{aligned}$$

Donc la fonction $t \rightarrow P_{xy}(t)$ est dérivable, et

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P_{xy}(t) &= \sum_{z \neq x} Q_{xz}P_{zy}(t) - q_x P_{xy}(t) \\ &= \sum_z Q_{xz}P_{zy}(t). \end{aligned}$$

□

Le raisonnement qui précède montre que

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Z_1 = y, T_1 \in B, Z_2 = z, T_2 - T_1 \in C | Z_0 = x) \\ = \int_B \int_C R_1(x, y, dt) R_1(y, z, du) \end{aligned}$$

Cette formule se généralise à la loi de $((Z_1, T_1), \dots, (Z_n, T_n))$. Partant de cette loi jointe, on pourrait en déduire que le processus de saut correspondant $\{X_t, t \geq 0\}$ est markovien.

Remarque 7.3.3. *Si on se donne un générateur quelconque Q , on peut définir R_1 , et donc la loi des (Z_x, T_x) . Mais la suite $\{T_n\}$ correspondante ne vérifie pas forcément la condition de non-explosion (7.1), i.e. le processus $\{X_t\}$ correspondant n'est pas forcément défini pour tout $t \geq 0$. On donnera à la section suivante des conditions suivantes sur Q pour que ce soit le cas.*

7.4 Chaîne de Markov incluse

Soit $\{X_t; t \geq 0\}$ un processus de Markov dont les temps de saut $T_1, T_2, \dots, T_n, \dots$ vérifient la condition de non-explosion (7.1). La suite $\{Z_n; n \in \mathbb{N}\}$ définie par

$$Z_n = X_{T_n} \quad (\text{avec } T_0 = 0)$$

est une chaîne de Markov en temps discret (c'est une conséquence de la propriété de Markov forte de $\{X_t\}$), appelée la "chaîne incluse", qui a la particularité que $Z_{n+1} \neq Z_n$ p.s., $\forall n \geq 0$. Sa matrice de transition P se calcule aisément en fonction du générateur Q de $\{X_t\}$:

$$P_{xy} = \begin{cases} (-Q_{xx})^{-1} Q_{xy}, & \text{si } y \neq x; \\ 0, & \text{si } y = x. \end{cases}$$

Posons, pour $n \geq 1$,

$$S_n = q_{Z_{n-1}}(T_n - T_{n-1}) \quad (\text{où } q_x = -Q_{xx}),$$

et pour $t \geq 0$,

$$N_t = \sup\left\{n; \sum_{k=1}^n S_k \leq t\right\}.$$

Alors $\{N_t; t \geq 0\}$ est un processus de Poisson d'intensité 1 (utiliser la propriété de Markov forte de $\{X_t\}$, et le fait que si $U \simeq$ exponentielle (λ) , $\lambda U \simeq$ exponentielle (1)).

Réciproquement, soit Q un générateur infinitésimal, i. e. une matrice indécrite par $E \times E$, telle que pour tout $x \in E$,

$$Q_{xy} \geq 0, \quad y \neq x; \quad Q_{xx} = -\sum_{y \neq x} Q_{xy} < 0.$$

On pose $q_x = -Q_{xx}$, et on définit la matrice de transition P par

$$P_{xy} = \begin{cases} \frac{Q_{xy}}{q_x}, & \text{si } y \neq x; \\ 0, & \text{si } y = x. \end{cases} \quad (7.2)$$

A toute condition initiale $x \in E$, on associe la chaîne de Markov $\{Z_n, n \geq 0\}$ de matrice de transition P . Soit maintenant $\{N_t; t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité 1, indépendant de la chaîne $\{Z_n; n \in \mathbb{N}\}$. On note $0 = T_0 < T_1 < T_2 < \dots$ les instants de saut du processus de Poisson, et on définit, pour $n \geq 1$,

$$S_n = \frac{T_n - T_{n-1}}{q(Z_{n-1})},$$

$$T'_n = S_1 + \dots + S_n.$$

Si la condition de non explosion (7.1) est satisfaite, alors

$$X_t \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \geq 0} Z_n \mathbf{1}_{[T'_n, T'_{n+1}[}(t), \quad t \geq 0 \quad (7.3)$$

est un processus de Markov de générateur infinitésimal Q .

Il reste à répondre à la question : étant donné un générateur infinitésimal Q , quand est-ce que la suite de temps d'arrêt $\{T'_n, n \geq 0\}$ associée vérifie la condition de non-explosion, i. e. quand est-ce que (7.3) définit X_t pour tout $t \geq 0$? On va montrer la

Proposition 7.4.1. *La condition de non explosion (7.1) est satisfaite ssi*

$$\sum_{n \geq 0} q_{Z_n}^{-1} = +\infty \text{ p.s.} \quad (7.4)$$

Commençons par énoncer le

Corollaire 7.4.2. *Pour qu'un générateur infinitésimal Q soit le générateur infinitésimal d'un processus de Markov qui satisfait la condition (7.1), il suffit que l'une des deux conditions suivantes soit satisfaite*

1. $\sup_{x \in E} q_x < \infty$.
2. *La chaîne de Markov $\{Z_n\}$ de matrice de transition P définie (7.2) est récurrente.*

Il est clair que que chacune des deux conditions du Corollaire entraîne (7.4). La Proposition résulte maintenant du Lemme suivant, en posant

$$A_n = T_{n+1} - T_n, \quad B_n = \frac{1}{q_{Z_n}}; \quad n \geq 0.$$

Lemme 7.4.3. *Soit $\{A_n, n \geq 1\}$ et $\{B_n, n \geq 1\}$ deux suites indépendantes de v. a. à valeurs dans \mathbb{R}_+^* , la suite des $\{A_n\}$ étant i. i. d. de loi commune la loi exponentielle de paramètre 1. Alors il y a équivalence entre*

1. $\sum_{n=1}^{\infty} A_n B_n = +\infty$ p. s.
2. $\sum_{n=1}^{\infty} B_n = +\infty$ p. s.

PREUVE Il résulte de l'indépendance des deux suites que le Lemme est une conséquence du fait que pour toute suite $\{b_n, n \geq 1\}$ de nombres strictement positifs,

$$\sum_{n=1}^{\infty} A_n b_n = +\infty \text{ p. s.} \iff \sum_{n=1}^{\infty} b_n = +\infty. \quad (7.5)$$

Si $\sum_n b_n < \infty$, alors $\mathbb{E} \sum_n A_n b_n = \sum_n b_n < \infty$, donc a fortiori $\sum_n A_n b_n < \infty$ p. s. Il reste à montrer que si $\sum_n b_n = +\infty$, alors

$$\Lambda_n := \sum_{k=1}^n A_k b_k \rightarrow +\infty \text{ p. s., quand } n \rightarrow \infty.$$

Dans le cas où il existe une sous-suite n_j telle que $b_{n_j} \rightarrow +\infty$, clairement $\sum_n A_n b_n \geq \sum_j A_{n_j} b_{n_j} = +\infty$, car les A_{n_j} étant i. i. d. de loi exponentielle,

une infinité d'entre eux est plus grande que 1. Il reste donc à considérer le cas où $0 \leq b_n \leq C$ et $\sum_n b_n = +\infty$. Alors pour tout $M > 0$, si n est assez grand pour que $\mathbb{E}\Lambda_n > 2M$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\Lambda_n \leq M) &\leq \mathbb{P}\left(|\Lambda_n - \mathbb{E}\Lambda_n| \geq \frac{\mathbb{E}\Lambda_n}{2}\right) \\ &\leq 4 \frac{\text{Var}(\Lambda_n)}{(\mathbb{E}\Lambda_n)^2} = 4 \frac{\sum_1^n b_k^2}{(\sum_1^n b_k)^2} \\ &\leq \frac{4C}{\sum_1^n b_k} \rightarrow 0, \end{aligned}$$

et donc $\Lambda_n \rightarrow +\infty$ en probabilité, et donc p. s. par monotonie de la suite. Le Lemme est établi.

Remarque 7.4.4. *Au chapitre suivant, nous précisons des processus markoviens de sauts en indiquant leur générateur infinitésimal Q . On pourra vérifier que tous les exemples traités satisfont l'une des conditions (en fait en général la première) du Corollaire 7.4.2.*

7.5 Classification des états

Dans ce qui suit, on désignera comme dans le cas du temps discret par \mathbb{P}_x la loi conditionnelle de $\{X_t, t \geq 0\}$, sachant que $X_0 = x$. Les classes d'équivalence du processus de Markov $\{X_t; t \geq 0\}$ sont celles de la chaîne incluse. Notons que dès que $\{X_t; t \geq 0\}$ est irréductible,

$$P_{xy}(t) > 0, \quad \forall x, y \in E, t > 0. \quad (7.6)$$

En effet, pour tout $x, y \in E$, il existe $n \geq 1$ et $x_0 = x, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n = y$ tels que $Q_{x_{k-1}x_k} > 0$, $1 \leq k \leq n$, et il résulte des propriétés de la loi exponentielle que $P_{xy}(t) \geq P_{xx_1}(t/n) \times \dots \times P_{x_{n-1}y}(t/n) > 0$.

Un état $x \in E$ est dit récurrent (resp. transitoire) pour $\{X_t; t \geq 0\}$ s'il est récurrent (resp. transitoire) pour la chaîne incluse. Donc en particulier dans le cas irréductible, tous les états sont soit récurrents soit transitoires.

On a, comme dans le cas des chaînes en temps discret, le

Théorème 7.5.1. *Soit $\{X_t; t \geq 0\}$ un processus de Markov irréductible et récurrent. Alors il existe une mesure strictement positive π sur E solution*

de l'équation $\pi Q = 0$, unique à une constante multiplicative près. En outre, une telle mesure est invariante par le semi-groupe $\{P(t)\}$, i. e. $\pi P(t) = \pi$, $\forall t \geq 0$.

PREUVE On remarque que si Q désigne le générateur infinitésimal du processus $\{X_t\}$ et P la matrice de transition de sa chaîne incluse, alors

$$Q = \mathbf{q}(P - I),$$

où \mathbf{q} désigne la matrice diagonale définie par

$$\mathbf{q}_{xy} = \delta_{xy}q_x, \quad x, y \in E.$$

Notons que l'hypothèse que le processus est irréductible entraîne que $q_x > 0$, $\forall x \in E$. Donc on va pouvoir sans problème diviser par \mathbf{q} . L'hypothèse est que la chaîne incluse est irréductible et récurrente. Donc la mesure γ^x définie dans la preuve du Théorème 2.5.3 est strictement positive, et elle est l'unique (à une constante multiplicative près) solution de l'équation $\gamma^x P = \gamma^x$. Donc la mesure strictement positive $\mu^x = \mathbf{q}^{-1}\gamma^x$ vérifie $\mu^x Q = 0$, et toute autre solution μ' de cette équation est telle que $\mathbf{q}\mu'$ est invariante par P , donc il existe une constante c telle que $\mu' = c\mu$. On a la formule suivante pour la mesure μ^x :

$$\begin{aligned} \mu_y^x &= \frac{\gamma_y^x}{q_y} = \mathbb{E}_x \int_0^{R_x} \mathbf{1}_{\{X_s=y\}} ds \\ &= \mathbb{E}_x \int_0^\infty \mathbf{1}_{\{X_s=y, s < R_x\}} ds. \end{aligned}$$

Mais si $t > 0$, par la propriété de Markov forte,

$$\mathbb{E}_x \int_0^t \mathbf{1}_{\{X_s=y\}} ds = \mathbb{E}_x \int_{R_x}^{R_x+t} \mathbf{1}_{\{X_s=y\}} ds.$$

Donc

$$\begin{aligned}
\mu_y^x &= \mathbb{E}_x \int_t^{R_x+t} \mathbf{1}_{\{X_s=y\}} ds \\
&= \mathbb{E}_x \int_0^{R_x} \mathbf{1}_{\{X_{t+s}=y\}} ds \\
&= \int_0^\infty \mathbb{P}_x(X_{t+s} = y, s < R_x) ds \\
&= \int_0^\infty \sum_z \mathbb{P}_x(X_s = z, s < R_x) P_{zy}(t) ds \\
&= \sum_z \mu_z^x P_{zy}(t).
\end{aligned}$$

□

7.6 Le cas irréductible récurrent

Pour distinguer entre récurrence positive ou nulle (cette question ne se pose que dans le cas $|E| = +\infty$), il ne suffit pas de regarder ce qu'il en est de la chaîne incluse, comme on va maintenant le voir. Définissons l'instant du premier retour à l'état x comme :

$$R_x = \inf\{t \geq T_1; X_t = x\}$$

Définition 7.6.1. *L'état x est dit récurrent positif s'il est récurrent et si $\mathbb{E}_x(R_x) < \infty$, récurrent nul s'il est récurrent et si $\mathbb{E}_x(R_x) = +\infty$.*

A nouveau, dans le cas irréductible récurrent, tous les états sont soit récurrents nuls, soit récurrents positifs, et suivant le cas on dit que le processus $\{X_t\}$ est transitoire, récurrent nul ou récurrent positif. Le cas récurrent positif est équivalent à l'existence d'une unique probabilité invariante, comme on va maintenant le montrer.

Théorème 7.6.2. *Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts irréductible. Alors un état $x \in E$ est récurrent positif si et seulement si tous les états sont récurrents positifs, si et seulement si il existe une probabilité invariante π , et dans ce cas*

$$\mathbb{E}_x R_x = \frac{1}{\pi_x q_x}, \quad \forall x \in E.$$

PREUVE Si x est récurrent positif pour $\{X_t\}$, alors x est récurrent pour la chaîne incluse $\{Z_n, n \geq 0\}$. On désigne par γ_y^x le nombre moyen de visites à l'état y lors d'une excursion de $\{Z_n\}$ partant de x . Il résulte de ce que la durée de chaque séjour à l'état y est indépendante de la chaîne incluse, et d'espérance q_y^{-1} que

$$\mathbb{E}_x R_x = \sum_{y \in E} \frac{\gamma_y^x}{q_y}.$$

Mais on a vu dans la preuve du Théorème 7.5.1 que la mesure μ^x définie par

$$\mu_y^x = \frac{\gamma_y^x}{q_y}$$

vérifie $\mu^x Q = 0$. La condition x récurrent positif entraîne donc l'existence d'une mesure invariante de masse finie, donc d'une probabilité invariante. Supposons réciproquement qu'il existe une probabilité π solution de $\pi Q = 0$. Alors la mesure $q\pi$ est invariante par P , et pour tout $x, y \in E$,

$$\frac{q_y \pi_y}{q_x \pi_x}$$

est le nombre moyen de visites à l'état y au cours d'une excursion de $\{Z_n\}$ partant de x . Donc

$$\mathbb{E}_x R_x = \sum_{y \in E} \frac{\pi_y}{q_x \pi_x} < \infty, \quad \forall x \in E,$$

et n'importe quel état $x \in E$ est récurrent positif. \square

Nous allons maintenant nous limiter au cas récurrent positif, et établir le théorème ergodique, puis établir la convergence des probabilités de transition vers la probabilité invariante.

Théorème 7.6.3. *Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts à valeurs dans E irréductible, récurrent positif. On note Q son générateur infinitésimal, et π l'unique probabilité invariante. Alors si $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ est bornée,*

$$\frac{1}{t} \int_0^t f(X_s) ds \rightarrow \sum_{x \in E} f(x) \pi_x$$

p. s. quand $t \rightarrow \infty$.

PREUVE Il suffit de considérer le cas $f(y) = \mathbf{1}_{\{y=x\}}$ et de travailler sous \mathbb{P}_x (cf. la preuve du Théorème 2.5.7). Comme dans le cas du temps discret, les excursions successives partant de x sont i. i. d.. On note $N^x(t)$ le nombre de visites à l'état x entre l'instant 0 et l'instant t , T_k^x le temps passé à l'état x par le processus $\{X_t\}$ au cours de sa k -ième visite. Puisque la $N^x(t)$ -ième visite à l'état x n'est pas forcément terminée à l'instant t , on a

$$\frac{1}{t} \sum_{k=1}^{N^x(t)-1} T_k^x < \frac{1}{t} \int_0^t \mathbf{1}_{\{X_s=x\}} ds \leq \frac{1}{t} \sum_{k=1}^{N^x(t)} T_k^x.$$

Mais clairement $T_{N^x(t)}^x/t \rightarrow 0$ p. s. quand $t \rightarrow \infty$, et

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} \sum_{k=1}^{N^x(t)} T_k^x &= \frac{N^x(t)}{t} \times \frac{1}{N^x(t)} \sum_{k=1}^{N^x(t)} T_k^x \\ &\rightarrow \frac{1}{\mathbb{E}_x R_x} \times \frac{1}{q_x} \\ &= \pi_x. \end{aligned}$$

En effet, puisque la suite $\{T_k^x, k \geq 1\}$ est i. i. d., et par la récurrence $N^x(t) \rightarrow \infty$ quand $t \rightarrow \infty$, p. s.

$$\frac{1}{N^x(t)} \sum_{k=1}^{N^x(t)} T_k^x \rightarrow \mathbb{E}_x(T_1^x) = \frac{1}{q_x}.$$

Enfin la preuve du fait que

$$\frac{t}{N^x(t)} \rightarrow \mathbb{E}_x(R_x)$$

suit le même argument que dans la preuve du Théorème 2.5.7. \square

Dans le cas du temps continu, la convergence de la loi de X_t vers la probabilité invariante quand $t \rightarrow \infty$ est vraie dans le cas irréductible et récurrent positif, sans restriction supplémentaire.

Théorème 7.6.4. *Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts à valeurs dans E irréductible, récurrent positif, et π l'unique probabilité solution de l'équation de l'équation de Fokker-Planck stationnaire. Alors pour toute probabilité μ sur E et $x \in E$, $(\mu P)_x(t) \rightarrow \pi_x$ quand $t \rightarrow \infty$.*

PREUVE On pourrait suivre la démarche de la preuve du Théorème 2.6.4, mais on va plutôt utiliser ce résultat.

Si l'on échantillonne le processus $\{X_t\}$ en posant $Y_n = X_{nh}$, $n = 0, 1, \dots$, où $h > 0$ est arbitraire, il est clair que $\{Y_n, n \in \mathbb{N}\}$ est une chaîne de Markov irréductible et apériodique d'après (7.6), dont l'unique probabilité invariante, qui ne dépend pas de h , est π . Admettons un instant le

Lemme 7.6.5. *Pour tout $t, h > 0$, $x, y \in E$,*

$$|P_{xy}(t+h) - P_{xy}(t)| \leq 1 - e^{-q_x h}.$$

Fixons $\varepsilon > 0$ et $x, y \in E$. On choisit tout d'abord $h > 0$ suffisamment petit pour que

$$1 - e^{-q_x s} \leq \varepsilon/2, \quad 0 \leq s \leq h,$$

puis on choisit N assez grand pour que

$$|P_{xy}(nh) - \pi_y| \leq \varepsilon/2, \quad \text{si } n \geq N.$$

On conclut que si $t \geq Nh$, en notant n l'entier tel que $nh \leq t < (n+1)h$,

$$|P_{xy}(t) - \pi_y| \leq |P_{xy}(t) - P_{xy}(nh)| + |P_{xy}(nh) - \pi_y| \leq \varepsilon.$$

Le théorème se déduit aisément de ce résultat, en découpant l'ensemble des points de départ en un ensemble fini qui supporte toute la mesure μ à δ près, et son complémentaire. Il reste à procéder à la

PREUVE DU LEMME 7.6.5 : On note que

$$\begin{aligned} |P_{xy}(t+h) - P_{xy}(t)| &= \left| \sum_z P_{xz}(h)P_{zy}(t) - P_{xy}(t) \right| \\ &= \left| \sum_{z \neq x} P_{xz}(h)P_{zy}(t) - (1 - P_{xx}(h))P_{xy}(t) \right| \\ &\leq 1 - P_{xx}(h). \end{aligned}$$

Remarque 7.6.6. *La convergence du Théorème 7.6.4 a lieu au sens de la convergence étroite des probabilités sur E . En effet d'une part quand $t \rightarrow \infty$, $(\mu P)_x(t) \rightarrow \pi_x$ pour tout $x \in E$, donc aussi pour tout sous-ensemble fini $F \subset E$, $\sum_{x \in F} (\mu P)_x(t) \rightarrow \sum_{x \in F} \pi_x$. Comme en outre $\mu P(t)$ et π sont des probabilités sur E , il n'est pas trop difficile de montrer que si $f : E \rightarrow \mathbb{R}$ est bornée,*

$$\sum_x (\mu P)_x(t) f(x) \rightarrow \sum_x \pi_x f(x), \quad \text{quand } t \rightarrow \infty.$$

Notons que si la probabilité invariante π est la loi de X_0 , le processus $\{X_t; t \geq 0\}$ est **stationnaire** au sens où pour tout $n \in \mathbb{N}$, $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n$, la loi du vecteur aléatoire $(X_{t_1+s}, X_{t_2+s}, \dots, X_{t_n+s})$ ne dépend pas de $s \geq 0$.

Remarque 7.6.7. L'équation $\pi Q = 0$ s'écrit $\forall x \in E$,

$$\sum_{y \neq x} \pi_y Q_{yx} = \pi_x \sum_{y \neq x} Q_{xy}.$$

Le membre de gauche de cette égalité s'interprète comme le flux entrant dans l'état x à l'équilibre en provenance des différents états, et le membre de droite comme le flux sortant de x à l'équilibre, vers les divers états. L'équation $\pi Q = 0$ dit donc qu'à l'équilibre, les nombres moyen par unité de temps de départs et d'arrivées à chaque état sont égaux.

On a aussi dans ce contexte une généralisation du théorème de la limite centrale.

Théorème 7.6.8. Supposons que le processus markovien de sauts $\{X_t; t \geq 0\}$ est irréductible, et qu'il possède une probabilité invariante π . Soit $f \in L^2(E, \pi)$ de la forme $f = Qg$, avec $g \in L^2(E, \pi)$ [ceci entraîne que $\langle \pi, f \rangle = \sum_x \pi_x f_x = \sum_{xy} \pi_x Q_{xy} g_y = 0$].

On pose

$$C(f) := -2 \sum_{x \in E} f_x g_x \pi_x,$$

que l'on supposera non nul (alors $C(f) > 0$). Alors

$$\frac{1}{\sqrt{tC(f)}} \int_0^t f(X_s) ds \rightarrow Z,$$

en loi, quand $t \rightarrow \infty$, où Z est une v.a.r. gaussienne centrée réduite.

On a aussi la convergence de $\left\{ \frac{1}{\sqrt{uC(f)}} \int_0^{tu} f(X_s) ds, t \geq 0 \right\}$ vers un mouvement brownien $\{B_t, t \geq 0\}$, quand $u \rightarrow \infty$.

7.7 Réversibilité

Etant donné un processus markovien de sauts $\{X_t; t \geq 0\}$, et $T > 0$, $\{\hat{X}_t^T = X_{T-t}, 0 \leq t \leq T\}$ est aussi markovien. Si la loi de X_0 est une probabilité invariante π , alors \hat{X}^T est homogène. Notons \hat{Q} son générateur infinitésimal. On a le

Théorème 7.7.1. $\hat{Q} = Q$ ssi la relation d'équilibre ponctuel

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

est satisfaite. Dans ce cas, on dit que le processus $\{X_t\}$ est réversible (pour la probabilité π , qui est nécessairement invariante).

PREUVE : On a, pour les mêmes raisons que la formule analogue pour le temps discret,

$$\hat{P}_{xy}(t) = \frac{\pi_y}{\pi_x} P_{yx}(t),$$

d'où l'on déduit en prenant la dérivée en $t = 0$

$$\hat{Q}_{xy} = \frac{\pi_y}{\pi_x} Q_{yx}.$$

Le résultat est maintenant évident.

Remarque 7.7.2. Comme dans le cas des chaînes en temps discret, un processus markovien de saut irréductible récurrent positif n'est pas nécessairement réversible. A nouveau, un contre-exemple est donné par le cas où pour un certain couple $x \neq y$, $Q_{xy} = 0 \neq Q_{yx}$, ce qui n'est pas contradictoire avec l'irréductibilité dès que $\text{card}E \geq 3$.

Remarque 7.7.3. Comme dans le cas du temps discret, déterminer un générateur Q connaissant une probabilité invariante π n'est pas difficile. Le plus simple est de chercher Q telle que le processus correspondant soit réversible par rapport à π , donc de chercher Q générateur infinitésimal irréductible, tel que la quantité $\pi_x Q_{xy}$ soit symétrique en x, y .

Déterminer la probabilité invariante, connaissant le générateur infinitésimal irréductible, est en général plus difficile. On peut chercher à résoudre l'équation

$$\pi_x Q_{xy} = \pi_y Q_{yx},$$

mais celle-ci n'a de solution que dans le cas réversible. Dans le cas non réversible, il faut résoudre l'équation $\pi Q = 0$. Si on sait deviner π à une constante multiplicative près, on peut utiliser le résultat suivant

Théorème 7.7.4. *Étant donnée une probabilité π sur E , on pose pour $x, y \in E$*

$$\hat{Q}_{xy} = \frac{\pi_y}{\pi_x} Q_{yx}.$$

Si

$$\sum_{y \neq x} \hat{Q}_{xy} = \sum_{y \neq x} Q_{xy},$$

alors π est une probabilité invariante, et \hat{Q} est le générateur du processus retourné.

PREUVE : En utilisant la première, puis la seconde identité de l'énoncé, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{y \neq x} \pi_y Q_{yx} &= \pi_x \sum_{y \neq x} \hat{Q}_{xy} \\ &= \pi_x \sum_{y \neq x} Q_{xy} \\ &= -\pi_x Q_{xx}, \end{aligned}$$

soit l'égalité $\pi Q = 0$. La seconde partie de l'énoncé est alors une conséquence de la formule contenue dans la preuve du théorème 7.7.1. \square

Notons que si l'on sait deviner le générateur du processus retourné, on en déduit la probabilité invariante à une constante multiplicative près, qui se calcule à l'aide d'une seule sommation.

7.8 Modèles markoviens d'évolution et Phylogénie

On va présenter les processus de Markov sur les arbres, qui sont couramment utilisées comme modèle en phylogénie. On considèrera des arbres binaires, avec ou sans racine. On représente à la figure 7.2 un arbre binaire avec racine (avec la racine en haut et les feuilles en bas!), et à la figure 7.3 un arbre binaire sans racine.

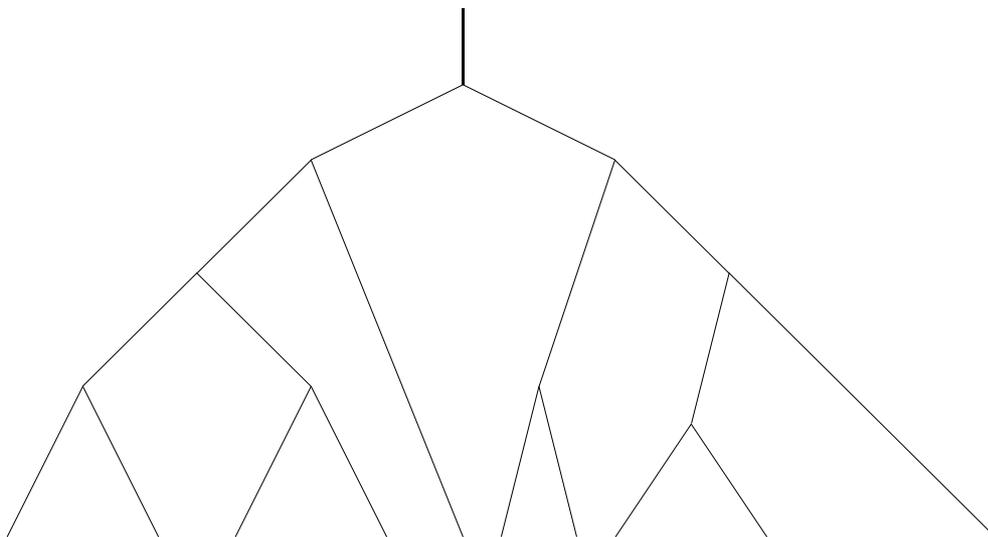


FIG. 7.2 – Arbre binaire avec racine

Processus de Markov sur un arbre avec racine Le processus part de la racine (qui joue le rôle de l'instant initial 0) dans un certain état, disons x . Il évolue jusqu'au premier noeud qui se trouve à la distance r de la racine, comme un processus markovien de sauts pendant l'intervalle de temps r . Notons y l'état du processus en ce noeud. Sur chaque branche qui part de ce noeud court un processus markovien de sauts, partant de y , de telle sorte que les deux processus sur les deux branches sont indépendants, jusqu'au prochain noeud, et ainsi de suite jusqu'aux feuilles de l'arbre. Notons que l'on considérera toujours un processus irréductible à valeurs dans un ensemble fini, donc ce sera un processus récurrent positif, et la loi du processus à la racine sera la probabilité invariante. On peut alors, sans modifier la loi du processus, supprimer la branche entre la racine et le premier noeud.

Processus de Markov sur un arbre sans racine Supprimons donc la branche entre la racine et le premier noeud. Cela signifie que le processus part de la racine (située au premier noeud) sous la probabilité invariante, et évolue indépendamment sur les deux branches, jusqu'à rencontrer les noeuds

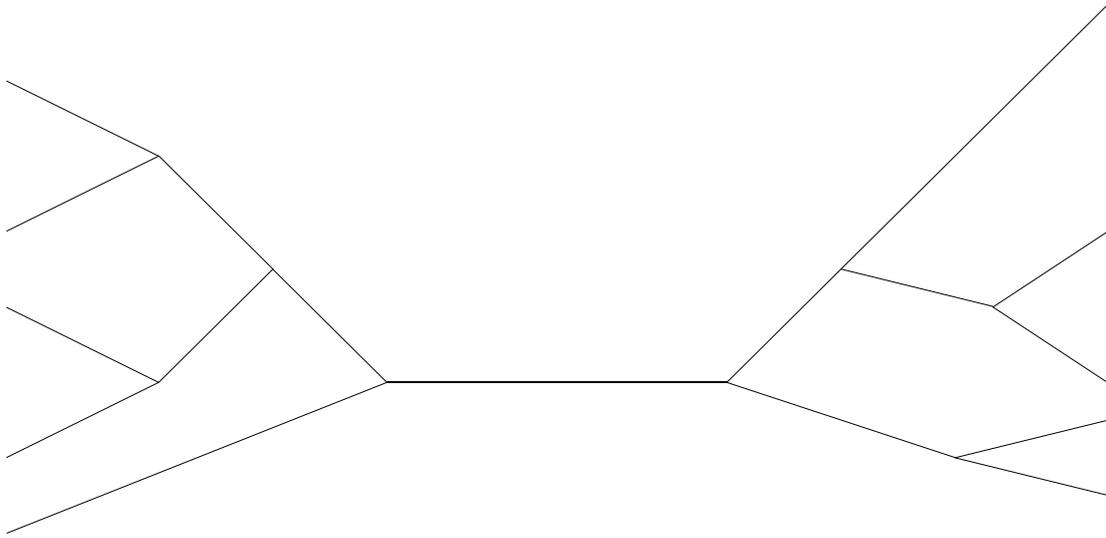


FIG. 7.3 – Le même arbre, sans racine

suivants, etc... Reportons-nous maintenant à la figure 7.3. La racine n'est plus marquée sur la branche centrale. On peut encore l'imaginer, et considérer que deux processus partent de ce point, un dans chaque sens, vers les deux noeuds aux extrémités de la branche centrale. Supposons maintenant que l'on déplace la racine sur la branche centrale, vers la droite ou vers la gauche. Il est assez facile de se convaincre de ce que la loi du processus résultant sur l'arbre n'est pas modifiée par un tel changement, à condition qu'il s'agisse d'un processus *réversible*. En effet, la différence entre les deux constructions avec la racine en deux points différents de la branche centrale est qu'une portion de cette branche est parcourue dans deux sens différents par le processus. Dans le cas réversible, la racine peut être placée équivalamment en une des deux extrémités de la branche centrale, ou même en n'importe quel noeud, ou n'importe quel point de l'arbre. On voit donc que l'on peut définir un processus markovien réversible sur un arbre sans racine, en plaçant le point de départ n'importe où sur l'arbre.

7.8.1 Modèles d'évolution

Pour préciser la vraisemblance d'un arbre au vu des données, il nous faut préciser un modèle d'évolution, qui indique comment ces données ont été "fabriquées" par l'évolution le long des branches de l'arbre, pour chaque site sur l'ADN. On va décrire plusieurs modèles markoviens d'évolution de l'ADN, en précisant les taux de transition d'un nucléotide à l'autre. C'est à dire que l'on précisera la matrice Q sous la forme

$$Q = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} & \text{a} & \text{c} & \text{g} & \text{t} \\ \text{a} & x & x & x & x \\ \text{c} & x & x & x & x \\ \text{g} & x & x & x & x \\ \text{t} & x & x & x & x \end{array} \end{array}$$

Le modèle de Jukes–Cantor (1969) C'est le plus simple, qui suppose que toutes les mutations se font au même taux, i.e. pour un certain $\alpha > 0$,

$$Q = \begin{pmatrix} -3\alpha & \alpha & \alpha & \alpha \\ \alpha & -3\alpha & \alpha & \alpha \\ \alpha & \alpha & -3\alpha & \alpha \\ \alpha & \alpha & \alpha & -3\alpha \end{pmatrix}.$$

La probabilité invariante associée est la probabilité uniforme sur les 4 nucléotides. Les probabilités de transition se calculent explicitement. $P(t) =$

$$\begin{pmatrix} 0,25 + 0,75e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} \\ 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 + 0,75e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} \\ 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 + 0,75e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} \\ 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 - 0,25e^{-4\alpha t} & 0,25 + 0,75e^{-4\alpha t} \end{pmatrix}.$$

Les modèles de Kimura (1980 et 1981) Parmi les quatre types de nucléotides, la cytosine et la thymine sont des pyrimidines, alors que l'adénine et la guanine sont des purines. Il est raisonnable de supposer que les transitions (remplacement d'une purine par une autre, ou d'une pyrimidine par une autre) sont plus fréquentes que les transversions (remplacement d'une purine par une pyrimidine ou vice versa). Donc on est amené à supposer que les taux de substitution entre **a** et **g** ou entre **c** et **t** sont plus élevés que tous

les autres, d'où le modèle (avec $\beta > \alpha$)

$$Q = \begin{pmatrix} -2\alpha - \beta & \alpha & \beta & \alpha \\ \alpha & -2\alpha - \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \alpha & -2\alpha - \beta & \alpha \\ \alpha & \beta & \alpha & -2\alpha - \beta \end{pmatrix}.$$

La probabilité invariante est encore la probabilité uniforme. Les probabilités de transition sont données par

$$P_{xx}(t) = 0,25 + 0,25e^{-4\beta t} + 0,5e^{-2(\alpha+\beta)t},$$

$$P_{xy}(t) = 0,25 + 0,25e^{-4\beta t} - 0,5e^{-2(\alpha+\beta)t},$$

si $x \neq y$ sont soit tous deux des purines, soit tous deux des pyrimidines,

$$P_{xy}(t) = 0,5 - 0,5e^{-4\beta t}$$

dans le dernier cas.

Kimura a proposé un second modèle, de la forme

$$Q = \begin{pmatrix} -\alpha - \beta - \gamma & \alpha & \beta & \gamma \\ \alpha & -\alpha - \beta - \gamma & \gamma & \beta \\ \beta & \gamma & -\alpha - \beta - \gamma & \alpha \\ \gamma & \beta & \alpha & -\alpha - \beta - \gamma \end{pmatrix},$$

pour lequel la probabilité invariante est encore la probabilité uniforme.

Le modèle de Felsenstein Etant donné une loi de probabilité π sur l'espace $E = \{\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{t}\}$, et un nombre positif u , Felsenstein a proposé le modèle

$$Q = \begin{pmatrix} u(\pi_{\mathbf{a}} - 1) & u\pi_{\mathbf{c}} & u\pi_{\mathbf{g}} & u\pi_{\mathbf{t}} \\ u\pi_{\mathbf{a}} & u(\pi_{\mathbf{c}} - 1) & u\pi_{\mathbf{g}} & u\pi_{\mathbf{t}} \\ u\pi_{\mathbf{a}} & u\pi_{\mathbf{c}} & u(\pi_{\mathbf{g}} - 1) & u\pi_{\mathbf{t}} \\ u\pi_{\mathbf{a}} & u\pi_{\mathbf{c}} & u\pi_{\mathbf{g}} & u(\pi_{\mathbf{t}} - 1) \end{pmatrix}.$$

Notons que clairement pour $x \neq y$,

$$\pi_x Q_{xy} = \pi_y Q_{yx},$$

donc π est la probabilité invariante, et la chaîne est réversible. La matrice Q possède deux valeurs propres : $-u$, dont l'espace propre associé est constitué

des vecteurs orthogonaux à π dans \mathbb{R}^4 , et 0, dont l'espace propre associé est constitué des vecteurs colinéaires au vecteur $(1, 1, 1, 1)$. Passant à l'exponentielle, on montre aisément que

$$P_{xy}(t) = (e^{tQ})_{xy} = e^{-ut}\delta_{xy} + (1 - e^{-ut})\pi_y.$$

Dans le cas particulier où $\pi = (1/4, 1/4, 1/4, 1/4)$, ce modèle se réduit à celui de Jukes–Cantor.

Le modèle d'Hasegawa, Kishino, Yano (1985) Il s'agit d'une généralisation à la fois du premier modèle de Kimura, et de celui de Felsenstein. Soit à nouveau π une probabilité sur E , et u, v deux nombres positifs.

$$Q = \begin{pmatrix} -u\pi_g - v\pi_2 & v\pi_c & u\pi_g & v\pi_t \\ v\pi_a & -u\pi_t - v\pi_1 & v\pi_g & u\pi_t \\ u\pi_a & v\pi_c & -u\pi_a - v\pi_2 & v\pi_t \\ v\pi_a & u\pi_c & v\pi_g & -u\pi_c - v\pi_1 \end{pmatrix},$$

où $\pi_1 = \pi_a + \pi_g$, $\pi_2 = \pi_c + \pi_t$. A nouveau π est la probabilité invariante. On peut encore donner une expression explicite pour $P(t)$.

Il y a de bonnes raisons de supposer que $\pi_c = \pi_g$ et $\pi_a = \pi_t$, puisque l'ADN est une molécule à deux brins, constitué de paires $c : g$ et $a : t$. L'égalité ci-dessus est une conséquence de l'hypothèse assez naturelle que l'évolution est la même sur les deux brins. Le modèle HKY, avec cette restriction, devient un modèle avec trois paramètres, à savoir u, v et $\theta = \pi_c + \pi_g$, qui a été proposé par Tamura en 1992. Il s'écrit

$$Q = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -u\theta - v & v\theta & u\theta & v(1 - \theta) \\ v(1 - \theta) & -u(1 - \theta) - v & v\theta & u(1 - \theta) \\ u(1 - \theta) & v\theta & -u(1 - \theta) - v & v(1 - \theta) \\ v(1 - \theta) & u\theta & v\theta & -u\theta - v \end{pmatrix}.$$

Le modèle réversible général Comme le cardinal de E est très petit, on peut chercher à utiliser le modèle le plus général. Tavaré a proposé une paramétrisation du modèle le plus général, qui prend la forme

$$Q = \begin{pmatrix} -uW & uA\pi_c & uB\pi_g & uC\pi_t \\ uD\pi_a & -uX & uE\pi_g & uF\pi_t \\ uG\pi_a & uH\pi_c & -uY & uI\pi_t \\ uJ\pi_a & uK\pi_c & uL\pi_g & -uZ \end{pmatrix},$$

où u est un paramètre positif, π la probabilité invariante,

$$\begin{aligned} W &= A\pi_c + B\pi_g + C\pi_t \\ X &= D\pi_a + E\pi_g + F\pi_t \\ Y &= G\pi_a + H\pi_g + I\pi_t \\ Z &= J\pi_a + K\pi_c + L\pi_g, \end{aligned}$$

et les paramètres A, B, \dots, L sont douze paramètres libres. Comme on le verra ci-dessous, il est important pour le calcul du maximum de vraisemblance que le modèle soit réversible. La contrainte de réversibilité impose six contraintes, à savoir

$$A = D, B = G, C = J, E = H, F = K, I = L.$$

Il reste donc six paramètres à choisir, par exemple A, B, C, E, F et I . Il y a en outre les 3 paramètres de la probabilité invariante, cela fait donc en tout 9 paramètres à choisir.

Modèles de codons Un codon est un triplet de nucléotides qui code pour un acide aminé. Parmi les $4^3 = 64$ codons possible, 3 sont des codons STOP possibles, les 61 autres codent pour les 20 acides aminés. Notons au passage que le code génétique (la règle de traduction des codons en amino-acides) est *dégénéré*, au sens où plusieurs codons codent pour le même amino-acide. Donc parmi les mutations possibles de codons, il faut distinguer les mutations synonymes (qui transforment un codon en un autre qui code pour le même acide aminé) des mutations non synonymes. Les dernières sont soit freinées, soit favorisées par la sélection, alors que les changements synonymes s'accumulent au taux des mutations. En général, le rapport mutations synonymes / mutation non synonymes est plus grand que 1.

Goldman et Yang ont proposé en 1994 un modèle comportant 63 paramètres, à savoir 60 paramètres pour les fréquences π_{xyz} , le taux de transition α , le taux de transversion β , et le rapport

$$\omega = \text{taux des mutations non synonymes} / \text{taux des mutations synonymes}.$$

Le modèle GY s'écrit

$$Q_{(x_1y_1z_1)(x_2y_2z_2)} = \begin{cases} 0 & \text{si 1 et 2 diffèrent par plus d'une base,} \\ \alpha\pi_{x_2y_2z_2} & \text{pour une transition synonyme,} \\ \beta\pi_{x_2y_2z_2} & \text{pour une transversion synonyme,} \\ \omega\alpha\pi_{x_2y_2z_2} & \text{pour une transition non synonyme,} \\ \omega\beta\pi_{x_2y_2z_2} & \text{pour une transversion non synonyme.} \end{cases}$$

Notons que sur les 63 paramètres à estimer, les 60 paramètres de la probabilité invariante π ne sont en général pas estimés par le maximum de vraisemblance, mais par les fréquences empiriques des divers codons dans les données. Une autre possibilité est d'estimer π_{xyz} par le produit $\pi_x^1\pi_y^2\pi_z^3$ des fréquences des divers nucléotides aux positions 1, 2 et 3 du codon.

Modèles non homogènes Une hypothèse implicite dans les modèles markoviens considérés jusqu'ici est la stationnarité. Le générateur infinitésimal est le même sur les diverses branches de l'arbre phylogénétique. Donc la probabilité invariante est la même sur les diverses branches, autrement dit les diverses séquences doivent avoir approximativement la même composition en bases. Certaines données contredisent nettement cette situation. On peut alors relâcher l'hypothèse d'homogénéité du processus de Markov sur tout l'arbre. Galtier et Gouy adoptent le modèle de Tamura, avec des paramètres α et β homogènes sur tout l'arbre, et un paramètre θ (qui règle la proportion de $\mathbf{g} + \mathbf{c}$) qui peut varier d'une branche à l'autre de l'arbre.

Dépendance ou indépendance entre les sites La plupart des modèles markoviens supposent que le comportement des divers sites au cours de l'évolution est un comportement i.i.d. Evidemment cette hypothèse n'est pas raisonnable, mais elle simplifie grandement les calculs.

Il y a à ce jour très peu de travaux qui proposent des modèles markoviens où les évolutions des différents sites sont corrélées. Citons le travail de G. Didier, qui propose un modèle où l'évolution de chaque site dépend des sites voisins. Indiquons une autre approche, utilisée par Pollock, Taylor et Goldman pour modéliser l'évolution de séquences de protéines.

Considérons un modèle du type

$$Q_{xy} = s_{xy}\pi_y,$$

qui est un modèle réversible, si $s_{xy} = s_{yx}$. On propose alors de modéliser l'évolution d'une paire de protéines en choisissant un générateur infinitésimal de la forme

$$\begin{aligned} Q_{xx',yx'} &= s_{xy}\bar{\pi}_{yx'}, \\ Q_{xx',xy'} &= s_{x'y'}\bar{\pi}_{xy'}, \\ Q_{xx',yy'} &= 0, \text{ si } x \neq y \text{ et } x' \neq y', \end{aligned}$$

où $\bar{\pi}$ est une probabilité invariante sur l'ensemble des paires de protéines.

Variation du taux d'évolution entre branches Etant donné un générateur infinitésimal Q , pour tout $u > 0$, uQ est encore un générateur infinitésimal. Supposons que Q est constant sur tout l'arbre. Si u est lui aussi constant sur l'arbre, puisque les feuilles (les espèces d'aujourd'hui) sont équidistantes (les distances sont mesurées en temps) de l'ancêtre commun situé à la racine, alors on est dans la situation de l'hypothèse d'une "horloge moléculaire". Certains jeux de données sont incompatibles avec une telle hypothèse. On doit alors, pour utiliser un modèle cohérent avec de telles données, permettre au paramètre u de prendre une valeur différente sur chaque branche de l'arbre. On a donc un nouveau paramètre par branche, ce qui fait au total beaucoup de paramètres.

Un autre point de vue est de supposer que u est la valeur prise par un processus stochastique, qui évolue sur l'arbre comme un processus de Markov, soit en temps continu, soit en temps discret (et alors la valeur du processus est constante sur chaque branche, les changements se produisant aux noeuds). Conditionnellement en les valeurs prises par ce processus, les divers nucléotides évoluent comme des processus de Markov non homogènes sur l'arbre. On est alors dans un cadre bayésien, qui se prête à des calculs grâce aux méthodes de simulation dites "Monte Carlo par Chaînes de Markov" (voir plus loin).

Variation du taux d'évolution entre sites Le modèle le plus fréquent de variation de taux entre sites est de supposer que les taux associés aux divers sites sont i.i.d., de loi commune une loi gamma (ou une discrétisation de cette loi).

Une autre approche, dûe à Felsenstein et Churchill consiste à supposer que les taux forment, le long de la séquence d'ADN considérée, une chaîne

de Markov (qui est en fait “cachée”), à valeurs dans un ensemble de cardinal petit (pour des raisons pratiques).

Modèles dit “covarion” Il s’agit de modèles où le taux d’évolution est non seulement différent d’un site à l’autre, mais aussi, pour un site donné, d’une branche à l’autre de l’arbre. Covarion est un acronyme pour “CONcomitantly VARIABLE codON”.

Posons $E = \{a, c, g, t\}$, $G =$ l’ensemble des valeurs possibles pour le taux u . Galtier considère en chaque site un processus de Markov indépendant, à valeurs dans $E \times G$.

7.8.2 Vraisemblance en phylogénie

La comparaison des génomes de diverses espèces est maintenant le principal outil pour tenter de reconstruire des arbres phylogénétiques. Il existe plusieurs algorithmes qui construisent de tels arbres. Nous allons donner des indications sur la méthode du maximum de vraisemblance.

Notons que l’on peut comparer des gènes (i.e. des collections d’acides aminés), ou bien des séquences d’ADN. Nous nous limiterons pour fixer les idées aux séquences d’ADN.

Calcul de la vraisemblance d’un arbre Pour fixer les idées, supposons que l’on utilise le modèle de Felsenstein. Le temps t correspond ici à une distance sur l’arbre. Notons que le seul paramètre d’intérêt est le produit $u \times t$. Quitte à modifier en conséquence les longueurs des branches de l’arbre, on peut toujours se ramener à $u = 1$, ce que nous supposons dorénavant.

Nous ne considérerons dans la suite que des *arbres binaires*.

On va supposer dans cette section que les différents sites évoluent indépendamment les uns des autres, et tous au même taux, ce taux étant également constant dans tout l’arbre. Cette hypothèse n’est pas très réaliste, et beaucoup de travaux récents se concentrent sur la détection des sites qui évoluent plus vite que les autres, éventuellement dans une partie seulement de l’arbre, mais pour démarrer l’étude et construire un premier arbre, il est naturel de faire l’hypothèse simplificatrice que nous venons d’énoncer. Une autre hypothèse assez utilisée est que les taux d’évolution des différents sites sont des v.a. i. i. d., de loi commune une loi Gamma.

L'information à notre disposition, les *données*, est constituée d'un jeu de k séquences alignées, de longueur m , i.e. pour chaque site s , $1 \leq s \leq m$, on a k lettres dans l'alphabet \mathbf{a} , \mathbf{c} , \mathbf{g} , \mathbf{t} , une pour chaque feuille de l'arbre. A chaque arbre binaire enraciné T possédant k feuilles, on va associer la vraisemblance $L(T)$, fonction des données. La vraisemblance $L(T)$ est un produit de $s = 1$ à m des vraisemblances associées à chaque site s :

$$L(T) = \prod_{s=1}^m L_s(T).$$

Chaque $L_s(T)$ se calcule en utilisant la propriété de Markov, comme nous allons maintenant le voir.

Soit T un arbre enraciné. On peut par exemple coder les noeuds d'un tel arbre comme suit, en partant de la racine, vers les feuilles (cf. figure 7.4) :

- 0 désigne la racine ;
- 1, 2 sont les “fils” de la racine, i.e. les noeuds qui sont directement reliés à la racine par une branche ;
- 1.1, 1.2 désignent les fils de 1 ; 2.1, 2.2 les fils de 2 ;
- et ainsi de suite jusqu'aux feuilles.

Pour tout noeud $\alpha \in T \setminus \{0\}$, on note ℓ_α la longueur de la branche qui joint le “père” de α à α , et on associe à α l'ensemble Λ_α des feuilles du sous-arbre dont α est la racine. En particulier, Λ_0 désigne l'ensemble des feuilles de l'arbre. Si $\alpha \in \Lambda_0$, $\Lambda_\alpha = \{\alpha\}$. Si $\alpha \in T \setminus \Lambda_0$, on note $\Gamma_\alpha = \{\alpha.1, \alpha.2\}$ les “fils” de α .

On note $\{X_\alpha, \alpha \in T\}$ les nucléotides aux noeuds de l'arbre. On suppose qu'ils constituent les valeurs aux noeuds de l'arbre d'un processus de Markov sur l'arbre de générateur infinitésimal Q . Seules les valeurs des $\{X_\alpha, \alpha \in \Lambda_0\}$ sont observées. On note x_α la valeur observée de X_α , pour $\alpha \in \Lambda_0$. La vraisemblance de l'arbre, au vu des nucléotides au site s , est

$$L_s(T) = \mathbb{P}_T (\cap_{\alpha \in \Lambda_0} \{X_\alpha = x_\alpha\}).$$

On va expliciter le calcul de cette quantité, ce qui mettra en évidence sa dépendance par rapport à l'arbre T .

Pour tout $\alpha \in T$, $x \in E$, on définit $L_{s,x}^{(\alpha)}$, la vraisemblance conditionnelle du sous-arbre dont α est la racine, conditionnée par $X_\alpha = x$, par la récurrence montante suivante.

- Si $\alpha \in \Lambda_0$,

$$L_{s,x}^{(\alpha)} = \begin{cases} 1, & \text{si } x = x_\alpha; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

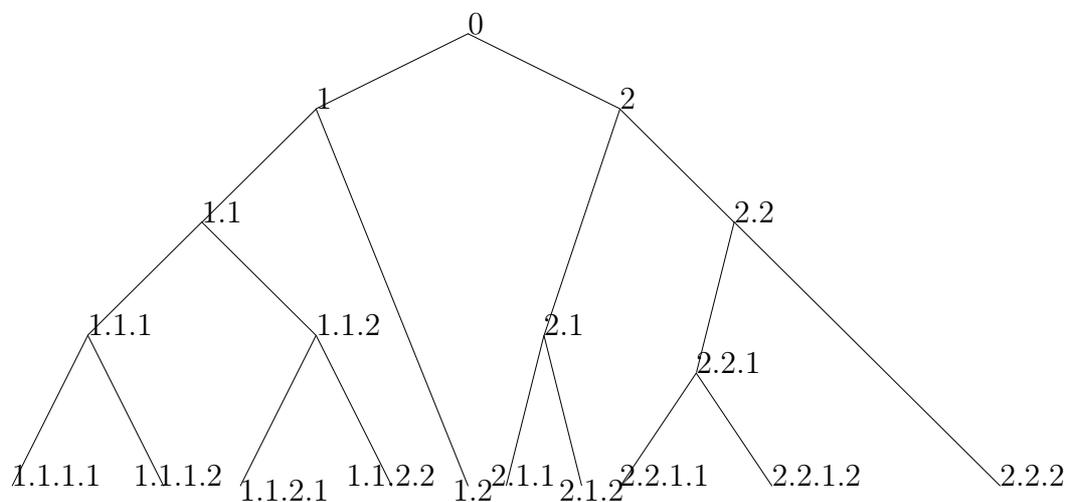


FIG. 7.4 – Arbre binaire avec racine, et codage des noeuds

– Sinon,

$$L_{s,x}^{(\alpha)} = \sum_{x_{\alpha.1}, x_{\alpha.2} \in E} P_{xx_{\alpha.1}}(\ell_{\alpha.1}) L_{s,x_{\alpha.1}}^{(\alpha.1)} \times P_{xx_{\alpha.2}}(\ell_{\alpha.2}) L_{s,x_{\alpha.2}}^{(\alpha.2)}.$$

Ce calcul conduit finalement à préciser les quantités $L_{s,x}^{(0)}$, $x \in E$. Enfin

$$L_s(T) = \sum_{x \in E} \pi_x L_{s,x}^{(0)},$$

et

$$L(T) = \prod_{s=1}^m L_s(T).$$

On aurait pu tout aussi bien écrire chaque $L_s(T)$ comme une somme de $4^{|T \setminus \Lambda_0|}$ termes. Mais les formules ci-dessus constituent l'algorithme qu'il faut utiliser en pratique.

Maximum de vraisemblance Le calcul du maximum de vraisemblance sur tous les arbres possibles est complexe. La partie la moins difficile consiste à maximiser par rapport aux longueurs des branches. Encore utilise-t-on un algorithme dont il n'est pas clair qu'il conduit à un maximum global. Celui-ci consiste à maximiser successivement par rapport à chaque longueur de branche, et à itérer la succession des maximisations tant que la vraisemblance augmente. On va voir maintenant que chaque maximisation par rapport à une longueur de branche se fait assez aisément.

Dans la mesure où les $\{X_\alpha, \alpha \in T\}$ sont issus d'un processus de Markov réversible sur l'arbre, la loi des $\{X_\alpha\}$ ne dépend pas du choix de la racine en n'importe quel noeud de l'arbre (ou plus généralement n'importe où sur une branche arbitraire).

Considérons deux noeuds voisins α et β de l'arbre. Désignons cette fois par $\ell_{\alpha\beta}$ la longueur de la branche qui les relie. Si l'on place la racine n'importe où sur cette branche, on définit comme ci-dessus des quantités $L_{s,x}^{(\alpha)}$ et $L_{s,y}^{(\beta)}$, $x, y \in E$. Attention cependant qu'il s'agit de la vraisemblance du sous-arbre dont α est la racine, dans un arbre dont on a déplacé la racine. Par exemple dans l'arbre de la figure 7.4, si $\alpha = 2$, $\beta = 2.2$, et on place la racine entre α et β , le sous-arbre dont α est la racine contient les noeuds 2, 0, 1, 1.1, 1.1.1, 1.1.1.1, 1.1.1.2, 1.1.2, 1.1.2.1, 1.1.2.2, 1.2, 2.1, 2.1.1, 2.1.2, et le sous-arbre dont β est la racine contient les noeuds 2.2.1, 2.2.1.1, 2.2.1.2, 2.2.2.

Alors

$$\begin{aligned} L_s(T) &= \sum_{x,y \in E} \pi_x P_{xy}(\ell_{\alpha\beta}) L_{s,x}^{(\alpha)} L_{s,y}^{(\beta)} \\ &= \sum_{x,y \in E} \pi_y P_{yx}(\ell_{\alpha\beta}) L_{s,x}^{(\alpha)} L_{s,y}^{(\beta)}. \end{aligned}$$

Cette procédure permet d'explicitier la dépendance de $L_s(T)$ et de $L(T)$ par rapport à la longueur d'une branche donnée, et de calculer le maximum par rapport à cette longueur. La recherche de ce maximum est en tout cas assez simple dans le cas du modèle d'évolution que nous avons décrit ci-dessus (on maximise le logarithme de $L(T)$, ce qui remplace le produit des $L_s(T)$ par une somme, et simplifie la maximisation).

Remarque 7.8.1. *Les modèles d'évolution ne sont pas tous réversibles. Il est encore possible d'explicitier la dépendance de la vraisemblance par rapport à la longueur d'une branche donnée, mais il faut alors prendre soin d'utiliser*

la probabilité de transition du processus retourné lorsque le déplacement de la racine conduit à ce que le processus partant de la nouvelle racine parcourt une branche dans le sens inverse du sens initial.

7.8.3 L'approche bayésienne en phylogénie

Reprenons l'écriture de la vraisemblance. Notons D le vecteur des variables aléatoires qui sont observées, et d le vecteur des valeurs observées (d comme "données"), i. e. d est constitué des diverses séquences génomiques alignées.

Précisons maintenant les paramètres dont dépend la vraisemblance. Dans les paramètres inconnus (que l'on cherche à préciser), il y

- d'une part la forme de l'arbre, que nous noterons τ , qui est une inconnue dans un ensemble fini \mathcal{T} (de cardinal $(2n-3)!!$ dans le cas d'un arbre enraciné avec n feuilles, $(2n-5)!!$ dans le cas sans racine – si k est un entier impair, $k!! = 1 \times 3 \times 5 \times \dots \times k$),

- d'autre part les longueurs des diverses branches, et la matrice de transition Q du modèle d'évolution (ou du moins les paramètres de cette matrice autres que la probabilité invariante). Les longueurs de branche et les paramètres inconnus de la matrice Q varient dans une partie d'un espace euclidien $V \subset \mathbb{R}^d$. On notera cet ensemble de paramètres λ .

Le paramètre inconnu est donc le couple $\theta = (\tau, \lambda)$, dont la valeur est arbitraire dans $\Theta = \mathcal{T} \times V$, et la vraisemblance est la fonction

$$L(\theta) = \mathbb{P}_\theta(D = d).$$

La vraisemblance de la valeur θ du paramètre inconnu est la probabilité d'observer les données que nous avons sous les yeux, si θ est la vraie valeur de ce paramètre.

Dans le point de vue bayésien, le paramètre inconnu θ est la réalisation d'une variable aléatoire, autrement dit (τ, λ) est la réalisation d'un vecteur aléatoire (T, Λ) . Prendre ce point de vue impose de se donner une *loi de probabilité a priori*, dont le bayésien nous dit qu'elle permet d'intégrer des informations a priori sur le paramètre inconnu, ce que refusent les anti-bayésiens, pour qui la seule information que l'on a le droit d'utiliser est celle contenue dans les données.

On va donc se donner une loi *a priori* pour le vecteur (T, Λ) , que l'on prendra de la forme suivante :

• on se donne la loi de T , qui est une loi sur un ensemble fini \mathcal{T} , donc on se donne des $\alpha_\tau = \mathbb{P}(T = \tau)$, $\tau \in \mathcal{T}$;

• on se donne la loi conditionnelle de Λ , sachant la valeur de T , et on suppose que pour tout $\tau \in \mathcal{T}$, la loi conditionnelle de Λ , sachant que $T = \tau$, admet une densité $q_\tau(\lambda)$, autrement dit pour toute fonction mesurable

$$f : \mathcal{T} \times V \rightarrow \mathbb{R}_+,$$

$$\mathbb{E}[f(T, \Lambda)] = \sum_{\tau \in \mathcal{T}} \int_V f(\tau, \lambda) p_\tau(\lambda) d\lambda,$$

à condition de noter $p_\tau(\lambda) = \alpha_\tau \times q_\tau(\lambda)$.

Dans ce contexte, on a un couple aléatoire, formé d'une part du "paramètre" (T, Λ) , et d'autre part des données D . La loi de ce couple est précisé par

- d'une part la loi a priori de (T, Λ) ;
- d'autre part la loi conditionnelle des données, sachant le paramètre.

Plus précisément, la vraisemblance s'interprète dans le contexte bayésien comme la probabilité conditionnelle :

$$L(\tau, \lambda) = \mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)).$$

On va alors chercher à calculer la loi *a posteriori*, qui est la loi conditionnelle du "paramètre" (T, Λ) , sachant les données, i. e. sachant que $D = d$. Cette loi conditionnelle est donnée par la célèbre "formule de Bayes", qui dans notre situation précise la loi de jointe de (T, Λ) sachant que $D = d$ sous la forme

$$p_\tau(\lambda | D = d) = \frac{\mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)) p_\tau(\lambda)}{\sum_{\tau \in \mathcal{T}} \int_V \mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)) p_\tau(\lambda) d\lambda}.$$

Autrement dit, à nouveau si

$$f : \mathcal{T} \times V \rightarrow \mathbb{R}_+,$$

$$\mathbb{E}[f(T, \Lambda) | D = d] = \frac{\sum_{\tau \in \mathcal{T}} \int_V f(\tau, \lambda) \mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)) p_\tau(\lambda) d\lambda}{\sum_{\tau \in \mathcal{T}} \int_V \mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)) p_\tau(\lambda) d\lambda}.$$

Par exemple, on peut s'intéresser à la loi de probabilité *a posteriori* de la forme de l'arbre, i. e. de la v. a. T . Celle-ci est donnée par la formule suivante : pour tout $\tau \in \mathcal{T}$,

$$\mathbb{P}(T = \tau | D = d) = \frac{\int_V \mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)) p_\tau(\lambda) d\lambda}{\sum_{\tau \in \mathcal{T}} \int_V \mathbb{P}(D = d | (T, \Lambda) = (\tau, \lambda)) p_\tau(\lambda) d\lambda}.$$

Méthode de calcul MCCM Supposons que l'on veuille calculer cette dernière quantité, pour un petit nombre de valeurs de τ . Un calcul explicite est sans espoir, compte tenu de la taille des données (nombre d'espèces considérées) et de la complexité croissante des modèles utilisés. On est donc amené à utiliser une méthode de type Monte Carlo, utilisant des tirages aléatoires. Cependant, il se présente une sérieuse difficulté pour réaliser des tirages aléatoires suivant la loi a posteriori de (T, Λ) , sachant les données, c'est que pour identifier cette loi, il est nécessaire de calculer le dénominateur dans les formules ci-dessus. Pour peu en particulier que le cardinal de \mathcal{T} soit gigantesque, ce calcul peut se révéler totalement impossible.

On se trouve exactement dans la même situation que celle décrite au début de la section 3.1.

Rappelons l'algorithme de Metropolis-Hastings. L'idée est la suivante. Soit Q une matrice de transition sur F (qui n'a a priori rien à voir avec la probabilité π), dont on soit capable de simuler aisément les transitions. On choisit comme matrice P la matrice de transition dont les termes hors diagonaux sont donnés par

$$P_{xy} = \min \left(Q_{xy}, \frac{\pi_y}{\pi_x} Q_{yx} \right),$$

et les termes diagonaux sont donnés par

$$P_{xx} = 1 - \sum_{y \neq x} P_{xy},$$

sous réserve que P ainsi définie soit irréductible, ce qui est par exemple vrai si Q est irréductible et vérifie la propriété : pour tout x, y , $Q_{xy} > 0 \Leftrightarrow Q_{yx} > 0$. Il est clair que cette matrice P est bien une matrice de transition ($P_{xy} \leq Q_{xy}$, $x \neq y$ implique que $P_{xx} \geq 0$), et que π est invariante par P , puisque la relation d'équilibre ponctuel

$$\pi_x P_{xy} = \pi_y P_{yx}, \quad \forall x \neq y$$

est bien satisfaite. Pour expliquer comment on simule les transitions de la chaîne de matrice de transition P , posons pour $x, y \in F$,

$$r(x, y) = \frac{P_{xy}}{Q_{xy}} = \min \left(1, \frac{\pi_y Q_{yx}}{\pi_x Q_{xy}} \right).$$

Une façon de simuler une transition de la chaîne $\{X_k\}$ de matrice de transition P est la suivante. Supposons que $X_k = x$, et on veut simuler X_{k+1} . On simule

d'abord une transition de la chaîne $\{Y_k\}$ de matrice de transition Q , partant de $Y_k = x$. Supposons que le résultat de ce tirage soit $Y_{k+1} = y$. On *accepte cette transition* (et dans ce cas $X_{k+1} = y$) avec la probabilité $r(x, y)$; on *refuse cette transition* (et dans ce cas $X_{k+1} = x$) avec la probabilité $1 - r(x, y)$. Remarquons $r(x, x) = 1$, donc dans le cas $y = x$, la “non-transition” est toujours acceptée.

Autrement dit, pour passer de $X_k = x$ à X_{k+1} , on effectue

- le tirage de Y_{k+1} , suivant la probabilité Q_x ;
- le tirage de U_{k+1} , de loi uniforme sur $[0, 1]$;

et on pose

$$X_{k+1} = Y_{k+1} \mathbf{1}_{\{U_{k+1} \leq r(x, Y_{k+1})\}} + X_k \mathbf{1}_{\{U_{k+1} > r(x, Y_{k+1})\}}.$$

Mise en oeuvre de la méthode MCCM La mise en oeuvre de la méthode MCCM pose des problèmes délicats, pour lesquels on n'a essentiellement pas de réponse satisfaisante, en particulier dans le cas de la phylogénie. Nous avons déjà discuté cette question dans un cadre général à la section 3.3. Rappelons qu'il convient d'éliminer le début de la simulation (*burn-in*). En outre, pour obtenir un échantillon de la loi a posteriori, on ne retient qu'une itération toutes les n , où n est choisi en fonction de la vitesse de décorrélation de la chaîne, laquelle peut être estimée à partir des simulations. Certaines mises en oeuvre consistent à simuler plusieurs chaînes en parallèle, dont éventuellement certaines sont “chauffées”, voir la section 3.1.4.

7.9 Application aux EDP discrétisées

Soit D un domaine borné de \mathbb{R}^2 (le résultat qui suit est en fait vrai en dimension quelconque), de frontière ∂D lipschitzienne. On suppose pour fixer les notations que l'origine $0 \in D$. On considère le problème de Dirichlet :

$$\begin{cases} \Delta u(x) = 0, & x \in D; \\ u(x) = f(x), & x \in \partial D; \end{cases}$$

avec $f \in C(D^e)$. Il est bien connu que cette équation admet une solution unique u élément de $C(D)$.

Etant donné $h > 0$, soit $h\mathbf{Z}^2$ l'ensemble des points du plan dont les coordonnées sont des multiples entiers relatifs de h . On pose $D_h = D \cap h\mathbf{Z}^2$.

∂D_h est constitué des points de $D^c \cap h\mathbf{Z}^2$ qui sont à distance h d'au moins un point de D_h , et $\bar{D}_h = D_h \cup \partial D_h$. e_1 et e_2 désignant les deux vecteurs de base, on définit l'opérateur approché Δ_h par :

$$(\Delta_h v)(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^2 (v(x + he_i) + v(x - he_i)) - v(x).$$

D'après l'Exercice 7.11.4, la solution du problème de Dirichlet discrétisé

$$\begin{cases} \Delta_h u_h(x) = 0, & x \in D_h; \\ u_h(x) = f(x), & x \in \partial D_h; \end{cases}$$

est donnée par la formule $u_h(x) = \mathbb{E}[f(X_{T_{D_h^c}^h}^h) | X_0^h = x]$, où $\{X_t^h; t \geq 0\}$ est un processus markovien de sauts de générateur infinitésimal $\frac{1}{2}\Delta_h$, à valeurs dans $h\mathbf{Z}^2$, et

$$T_{D_h^c}^h = \inf\{t \geq 0; X_t^h \in D_h^c\}.$$

Remarquons que $\{X_t^h, t \geq 0\}$ a même loi que $\{hX_{h^{-2}t}^1, t \geq 0\}$, et que d'après le début de la section 2.3 ce dernier processus converge vers un mouvement brownien standard unidimensionnel, quand $h \rightarrow 0$. Il n'est pas trop difficile (à condition tout de même notamment de bien comprendre cette notion de convergence de processus!) d'en déduire que

$$u_h(x) \rightarrow u(x) = \mathbb{E}[f(B_{T_{D^c}}) | B_0 = x],$$

(où $T_{D^c} = \inf\{t \geq 0; B_t \in D^c\}$), cette dernière formule donnant la solution du problème de Dirichlet. On a ainsi une preuve (alternative aux méthodes classiques d'analyse numérique) de la convergence de u_h vers u .

Notons enfin que le problème de Dirichlet discrétisé pourrait aussi s'interpréter en terme d'une chaîne de Markov en temps discret, de matrice de transition $\Delta_h + I$.

Ces interprétations probabilistes permettent aussi d'utiliser des méthodes de Monte Carlo pour le calcul approché de solutions d'EDP. Ces méthodes sont très utilisées dans certains cas où les méthodes d'analyse numérique "classique" ne sont pas efficaces, ou sont inutilisables (en particulier dans les cas de dimension trop grande), cf. [28]. Elles sont par ailleurs très appréciées pour leur simplicité de programmation. Quelques lignes de code suffisent pour programmer le calcul de la solution approchée d'une équation aux dérivées

partielles! Même s'il faut laisser tourner l'ordinateur un peu plus longtemps pour avoir la même précision qu'avec une méthode de différences, éléments ou volumes finis, le fait que la programmation soit facile, rapide, et surtout permette facilement la reprise du programme par un autre programmeur, quand le premier aura quitté le service ou l'entreprise.

7.10 Le recuit simulé (suite)

Dans cette section, E est supposé fini. Rappelons que l'on cherche à maximiser une fonction

$$U : E \rightarrow \mathbb{R}_-,$$

telle que, pour fixer les idées,

$$\max_{x \in E} U_x = 0.$$

Autrement dit, on cherche un des x tels que $U_x = 0$.

A chaque $\beta > 0$ on associe le générateur infinitésimal $Q = \{Q_{xy}, x, y \in E\}$ donné pour $x \neq y$ par

$$Q_{xy} = \mathbf{1}_{\{(x,y) \in G\}} \exp \left[\frac{\beta}{2} (U_y - U_x) \right],$$

où G est un graphe non orienté dans E , i.e. une collection de paires de point de E , choisie de telle sorte que le processus de générateur Q_{xy} soit irréductible (ce qui revient à dire que $\forall x, j \in E, \exists n$ et x_1, x_2, \dots, x_n tels que $(x, x_1) \in G, (x_1, x_2) \in G, \dots, (x_n, y) \in G$).

Le processus markovien de générateur infinitésimal Q est clairement réversible par rapport à sa probabilité invariante π_β définie par

$$\pi_{\beta,x} = Z_\beta^{-1} e^{\beta U_x}, \quad x \in E.$$

On définit la **forme de Dirichlet** associée à Q comme la forme bilinéaire sur \mathbb{R}^E :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\varphi, \varphi) &= \langle \varphi, -Q\varphi \rangle_\pi \\ &= - \sum_{x,y} \varphi_x Q_{xy} \varphi_y \pi_x \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} |\varphi_x - \varphi_y|^2 Q_{xy} \pi_x, \end{aligned}$$

où on a utilisé la réversibilité et deux fois l'identité $\sum_y Q_{xy} = 0$, donc $-Q : \ell^2(\pi) \rightarrow \ell^2(\pi)$ est autoadjoint semi défini positif.

Définition 7.10.1. On appelle **trou spectral** de Q la quantité :

$$\lambda \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\varphi \text{ non constante}} \frac{\mathcal{E}(\varphi, \varphi)}{\text{Var}_\pi(\varphi)},$$

$$\text{où } \text{Var}_\pi(\varphi) = \sum_{x \in E} \varphi_x^2 \pi_x - \left(\sum_{x \in E} \varphi_x \pi_x \right)^2.$$

Lemme 7.10.2. Q étant le générateur infinitésimal d'un processus de Markov irréductible à valeurs dans un espace fini E , son trou spectral vérifie

$$\lambda > 0.$$

PREUVE D'après la formule ci-dessus pour $\mathcal{E}(\varphi, \varphi)$, le quotient

$$\frac{\mathcal{E}(\varphi, \varphi)}{\text{Var}_\pi(\varphi)}$$

reste inchangé si l'on ajoute à φ une constante. On peut donc se contenter de minimiser ce rapport pour φ tel que $\mathbb{E}_\pi(\varphi) = 0$, d'où

$$\lambda = \inf_{\varphi \neq 0; \mathbb{E}_\pi(\varphi) = 0} \frac{\langle \varphi, -Q\varphi \rangle_\pi}{\langle \varphi, \varphi \rangle_\pi},$$

et λ est la plus petite valeur propre de $-Q$, considéré comme opérateur linéaire sur $\ell^2(\pi)$, restreint à l'orthogonal des constantes. Comme Q est autoadjoint semi défini positif, il suffit de montrer que l'espace propre associé à la valeur propre zéro est restreint aux constantes. Mais si φ appartient à cet espace propre,

$$\sum_y Q_{xy} \varphi_y = 0, \quad \forall x \in E,$$

donc a fortiori

$$0 = - \sum_{x,y} \varphi_x Q_{xy} \varphi_y \pi_x = \frac{1}{2} \sum_{x,y} |\varphi_x - \varphi_y|^2 Q_{xy} \pi_x,$$

ce qui, puisque Q est irréductible, entraîne bien que φ est constante. \square

Soit maintenant $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus de Markov de générateur infinitésimal Q . Pour tout $t > 0$, on note $\mu(t) = (\mu_x(t); x \in E)$ la loi de X_t . On pose

$$\varepsilon(t) = \sum_{x \in E} \left(\frac{\mu_x(t)}{\pi_x} - 1 \right)^2 \pi_x,$$

et on remarque que $\varepsilon(t) = 0$ ssi $\mu(t) = \pi$.

Lemme 7.10.3. λ désignant le trou spectral de Q ,

$$\varepsilon(t) \leq \varepsilon(0)e^{-2\lambda t}.$$

PREUVE On remarque tout d'abord que

$$\begin{aligned} \varepsilon(t) &= \sum_x \left(\frac{\mu_x(t)}{\pi_x} - 1 \right)^2 \pi_x \\ &= \sum_x \left(\frac{\mu_x(t)}{\pi_x} \right)^2 \pi_x - 1. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{dt}(t) &= 2 \sum_x \frac{\mu_x(t)\mu'_x(t)}{\pi_x} \\ &= 2 \sum_{x,y} \frac{\mu_x(t)\mu_y(t)Q_{yx}}{\pi_x} \\ &= 2 \sum_{x,y} \frac{\mu_x(t)}{\pi_x} \times \frac{\mu_y(t)}{\pi_y} \times \pi_y Q_{yx} \\ &= 2 \left\langle Q \left(\frac{\mu(t)}{\pi} \right), \frac{\mu(t)}{\pi} \right\rangle_{\pi} \\ &\leq -2\lambda \text{Var}_{\pi} \left(\frac{\mu(t)}{\pi} \right) \\ &= -2\lambda \varepsilon(t). \end{aligned}$$

Soit

$$\frac{d}{dt} \log \varepsilon(t) \leq -2\lambda.$$

□

On a montré que $\mu_t \rightarrow \pi$ à vitesse exponentielle (comparer avec le théorème 2.6.7).

On en arrive maintenant au “recuit”. On va faire dépendre β de t , et le faire tendre vers l’infini (et donc la “température”, son inverse, vers zéro) quand $t \rightarrow \infty$. Plus précisément, Δ étant une constante à déterminer, on choisit

$$\beta(t) = \frac{1}{\Delta} \log(1+t),$$

donc $\beta(0) = 0$ et $\beta(t) \rightarrow +\infty$ quand $t \rightarrow \infty$. Bien sûr, la chaîne n’est plus homogène, le générateur infinitésimal Q , le trou spectral λ , la mesure invariante π , et la constante de normalisation Z deviennent des fonctions de t : $Q(t)$, $\lambda(t)$, $\pi(t)$, $Z(t)$. Notons que $\pi(0)$ est la mesure uniforme sur E , $Z(0) = |E|^{-1}$, alors que $\pi(\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \pi(t)$ est la mesure uniforme sur les zéros de U (i.e. sur les maxima de U).

Notre but est de montrer le $[M \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{i \in E} (-U_i)]$:

Théorème 7.10.4. *Si $\Delta > M$, $\mu(t) \rightarrow \pi(\infty)$ quand $t \rightarrow \infty$.*

Nous allons tout d’abord montrer le :

Lemme 7.10.5.

$$\lambda(t) \geq \lambda(0) \left(\frac{1}{1+t} \right)^{\frac{M}{\Delta}}.$$

PREUVE Choisissons φ tel que $\mathbb{E}_{\pi(0)}[\varphi] = 0$. Alors par définition de $\lambda(0)$,

$$\frac{1}{2} \sum_{x,y} |\varphi_x - \varphi_y|^2 Q_{xy}(0) \pi_x(0) \geq \lambda(0) \sum_x \varphi_x^2 \pi_x(0).$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned} Q_{xy}(t) \pi_x(t) &= Q_{xy}(0) \frac{e^{\beta(t) \frac{U_x + U_y}{2}}}{Z(t)} \\ &\geq Q_{xy}(0) \frac{e^{-\beta(t)M} |E|}{Z(t)} \pi_x(0) \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_t(\varphi, \varphi) &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} |\varphi_x - \varphi_y|^2 Q_{xy}(t) \pi_x(t) \\
&\geq \frac{e^{-\beta(t)M} |E|}{2Z(t)} \sum_{x,y} |\varphi_x - \varphi_y|^2 Q_{xy}(0) \pi_x(0) \\
&\geq \lambda(0) e^{-\beta(t)M} \sum_x \varphi_x^2 \frac{1}{Z(t)} \\
&\geq \lambda(0) e^{-\beta(t)M} \sum_x \varphi_x^2 \pi_x(t) \\
&\geq \lambda(0) e^{-\beta(t)M} \text{Var}_{\pi(t)}(\varphi).
\end{aligned}$$

Les deux termes extrêmes de cette inégalité étant invariants par addition d'une constante à φ , l'inégalité résultante est vraie sans la restriction que $\mathbb{E}_{\pi(0)}[\varphi] = 0$. Le lemme est établi, puisque

$$e^{-\beta(t)M} = \left(\frac{1}{1+t} \right)^{\frac{M}{\Delta}}.$$

PREUVE DU THÉORÈME : Il suffit de montrer que $\varepsilon(t) \rightarrow 0$, où

$$\begin{aligned}
\varepsilon(t) &= \sum_x \left(\frac{\mu_x(t)}{\pi_x(t)} - 1 \right)^2 \pi_x(t) \\
&= \sum_x \frac{\mu_x(t)^2}{\pi_x(t)} - 1.
\end{aligned}$$

Notons que $\varepsilon(t)$ est un majorant du carré de la norme L^1 de la différence $\mu(t) - \pi(t)$. En effet, par Cauchy-Schwarz,

$$\sum_x |\mu_x(t) - \pi_x(t)| = \sum_x \frac{|\mu_x(t) - \pi_x(t)|}{\sqrt{\pi_x(t)}} \sqrt{\pi_x(t)} \leq \sqrt{\varepsilon(t)}.$$

On a

$$\begin{aligned}
\frac{d\varepsilon}{dt}(t) &= \sum_x \frac{d}{dt} \left[\frac{\mu_x(t)^2}{\pi_x(t)} \right] \\
&= \sum_x \pi_x(t)^{-2} \left[2\mu_x(t) \frac{d\mu_x(t)}{dt} \pi_x(t) - \mu_x(t)^2 \frac{d\pi_x(t)}{dt} \right] \\
&= -2\mathcal{E}_t \left(\frac{\mu(t)}{\pi(t)}, \frac{\mu(t)}{\pi(t)} \right) - \beta'(t) \sum_x U_x \frac{\mu_x^2(t)}{\pi_x^2(t)} \pi_x(t) \\
&\quad + \beta'(t) \sum_{x,y} \frac{U_y e^{\beta(t)U_y}}{Z^2(t)} \times \frac{\mu_x^2(t)}{\pi_x^2(t)} e^{\beta(t)U_x} \\
&\leq -2\lambda(t)\varepsilon(t) + \beta'(t)M(\varepsilon(t) + 1) \\
&\leq -(2\lambda(t) - M(\beta'(t))\varepsilon(t) + M\beta'(t)) \\
&\leq - \left(\frac{2\lambda(0)}{(1+t)^{M/\Delta}} - \frac{M}{\Delta(1+t)} \right) \varepsilon(t) + \frac{M}{\Delta(1+t)}
\end{aligned}$$

Comme $\Delta > M$, $(1+t)^{-M/\Delta} \gg (1+t)^{-1}$ quand $t \rightarrow \infty$, il existe $c > 0$ tel que, pour t assez grand :

$$\frac{d\varepsilon}{dt}(t) \leq -c(1+t)^{-M/\Delta}\varepsilon(t) + \frac{M}{\Delta}(1+t)^{-1},$$

et le théorème résulte du

Lemme 7.10.6. Soit $x, b \in C^1(\mathbb{R}_+; \mathbb{R}_+)$, $a \in C(\mathbb{R}_+; \mathbb{R}_+)$ tels que

- (i) $\int_0^\infty a(t) dt = +\infty$;
- (ii) $b(t) \searrow 0$ quand $t \rightarrow \infty$;
- (iii) $\frac{dx}{dt}(t) \leq -a(t)(x(t) - b(t))$.

Alors $x(t) \rightarrow 0$ quand $t \rightarrow \infty$.

PREUVE

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left(x(t) \exp \left(\int_0^t a(s) ds \right) \right) &= e^{\int_0^t a(s) ds} \left(\frac{dx}{dt}(t) + a(t)x(t) \right) \\
&\leq e^{\int_0^t a(s) ds} a(t)b(t).
\end{aligned}$$

Donc, en intégrant, on obtient :

$$x(t) \leq x(0)e^{-\int_0^t a(s)ds} + \int_0^t e^{-\int_s^t a(r)dr} a(s)b(s)ds.$$

Le second membre de l'inégalité ci-dessus est la solution d'une EDO linéaire, qui majore $x(t)$. Donc il suffit d'établir le résultat pour $x(t)$ solution de l'EDO, c'est à dire que l'on peut supposer que :

$$\frac{dx}{dt}(t) = -a(t)(x(t) - b(t)).$$

On pose $y(t) = x(t) - b(t)$. Il suffit de montrer que $y(t) \rightarrow 0$ quand $t \rightarrow \infty$.

$$\frac{dy}{dt}(t) = -a(t)y(t) - b'(t).$$

Notons que $b'(t) \leq 0$, et $-\int_t^\infty b'(s)ds = b(t) < \infty$. Donc pour $t \geq N$,

$$\begin{aligned} y(t) &= e^{-\int_0^t a(s)ds}y(0) - \int_0^t e^{-\int_s^t a(r)dr}b'(s)ds \\ &\leq e^{-\int_0^N a(s)ds}y(0) + \int_N^\infty |b'(s)|ds + e^{-\int_N^t a(r)dr} \int_0^N e^{-\int_s^N a(r)dr}|b'(s)|ds. \end{aligned}$$

Soit $\delta > 0$ arbitraire. On choisit N assez grand pour que la somme des deux premiers termes du membre de droite soit plus petit que $\frac{\delta}{2}$. En choisissant alors t assez grand, le troisième terme à son tour est plus petit que $\frac{\delta}{2}$. Le lemme est établi.

Remarque 7.10.7. La fonction $\beta(t) = \frac{1}{\Delta} \log(1+t)$ tend trop lentement vers l'infini quand $t \rightarrow \infty$, pour être utilisée en pratique. On peut montrer des résultats plus faibles que $\mu(t) \rightarrow \pi(\infty)$ avec une fonction β qui croît plus vite qu'un logarithme (fonction puissance). D'un autre côté, si on se pose la question d'atteindre le meilleur résultat possible sur un horizon fini fixé, on peut montrer qu'il existe des programmes de croissance de β à vitesse exponentielle qui sont proches de l'optimum.

7.11 Exercices

Exercice 7.11.1. Soit $\{T_n, n \geq 1\}$ un processus ponctuel de Poisson d'intensité λ , et $\{Z_n, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov indépendante de $\{T_n, n \geq 1\}$ à valeurs dans E , de matrice de transition $P_{xy}, x, y \in E$. On pose

$$X_t = \sum_{n=0}^{\infty} Z_n \mathbf{1}_{[T_n, T_{n+1}[}(t), \quad t \geq 0.$$

Montrer que $\{X_t, t \geq 0\}$ est un processus markovien de sauts dont on précisera la matrice de transition, le générateur infinitésimal, et la loi de l'instant du premier saut.

Exercice 7.11.2. Soit $\{X_t; t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts à valeurs dans l'ensemble fini ou dénombrable E , de générateur infinitésimal $\{Q_{xy}; x, y \in E\}$. On suppose que $\lambda := \sup_x -Q_{xx} < \infty$. Soit $\{N_t; t \geq 0\}$ le processus de comptage des sauts de $\{X_t\}$, et $\{N'_t, t \geq 0\}$ un processus de Poisson d'intensité λ .

Comparer $\mathbb{P}(N_t \geq n)$ et $\mathbb{P}(N'_t \geq n)$, ainsi que $\mathbb{E}[f(N_t)]$ et $\mathbb{E}[f(N'_t)]$, avec f une fonction croissante de \mathbb{N} dans \mathbb{R} . Montrer que l'exercice 7.11.1 fournit une autre démonstration de ce résultat.

Exercice 7.11.3. Soit $\{N_t, t \geq 0\}$ et $\{P_t, t \geq 0\}$ deux processus de Poisson indépendants, d'intensité respective λ et μ .

a Montrer que $\{X_t, t \geq 0\}$ défini par

$$X_t = N_t - P_t$$

est un processus markovien de sauts irréductible à valeurs dans \mathbf{Z} , dont on précisera le générateur infinitésimal.

b On suppose $\lambda \neq \mu$. Montrer que $\{X_t/t\}$ et $\{X_t\}$ convergent p.s. dans $\bar{\mathbb{R}}$ quand $t \rightarrow \infty$. Préciser la limite de $\{X_t\}$ suivant le signe de $\lambda - \mu$. Montrer que $\{X_t\}$ est transitoire.

c On suppose que $\lambda = \mu$. Préciser la loi de la chaîne incluse. Dédurre des exercices 2.9.7 et 2.9.9 que $\{X_t\}$ est récurrent nul.

Exercice 7.11.4. a Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts à valeurs dans E , de générateur infinitésimal $\{Q_{xy}; x, y \in E\}$. Soit F

une partie de E . On définit

$$T_F : \begin{cases} \inf\{t; X_t \in F\}, & \text{si un tel } t \text{ existe;} \\ \infty, & \text{sinon,} \end{cases}$$

la fonction $u : E \rightarrow \mathbb{R}$ par

$$u(x) = \mathbb{E}[h(X_{T_F})\mathbf{1}_{\{T_F < \infty\}} | X_0 = x],$$

où h est une application bornée de F dans \mathbb{R} , et la fonction $v : E \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ par

$$v(x) := \mathbb{E}[T_F | X_0 = x].$$

Montrer que T_F est un temps d'arrêt.

Montrer que u et v vérifient respectivement les équations :

$$\begin{aligned} Qu(x) &= 0, x \in E \setminus F \\ u(x) &= h(x), x \in F; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Qv(x) + 1 &= 0, x \in E \setminus F \\ v(x) &= 0, x \in F; \end{aligned}$$

(on introduira le conditionnement par $(T_1, X(T_1))$).

- b** On considère maintenant le cas d'un processus de naissance et de mort sur $E = \mathbf{Z}$, i.e. le générateur infinitésimal Q satisfaisant $Q_{x,x+1} = \alpha(x)$, $Q_{x,x-1} = \beta(x)$, $Q_{x,x} = -\alpha(x) - \beta(x)$, dans le cas particulier $\alpha(x) = \alpha$, $\beta(x) = \beta$, $x \in \mathbf{Z}$ ($\alpha, \beta > 0$). On pose $F = \{1, 2, \dots, N-1\}^c$, où N est un entier positif. Calculer $u(x) = \mathbb{E}[X_{T_F} | X_0 = x]$, $x \in \mathbf{Z}$. Montrer que T_F est p.s. fini. Déterminer la loi conditionnelle de la v.a. X_{T_F} , sachant que $X_0 = x$.

Exercice 7.11.5. Etant donné un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}_t, P)$ muni d'une filtration $\{\mathcal{F}\}$ (i.e. une collection croissante indexée par $t \in \mathbb{R}_+$ de sous-tribus de \mathcal{A}), on appelle **martingale** (par rapport à la filtration $\{\mathcal{F}_t\}$) un processus stochastique $\{M_t, t \in \mathbb{R}_+\}$ qui vérifie :

$$M_t \text{ est intégrable, } \forall t \geq 0; \mathbb{E}[M_t | \mathcal{F}_s] = M_s, \forall 0 \leq s \leq t.$$

- a** Soit $\{M_t, t \in \mathbb{R}_+\}$ une martingale continue à droite et S un temps d'arrêt borné par une constante t . Montrer que $\mathbb{E}[M_S] = \mathbb{E}[M_t] = \mathbb{E}[M_0]$.
- b** Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus markovien de sauts à valeurs dans E , de générateur infinitésimal $\{Q_{xy}; x, y \in E\}$, et f une application bornée de E dans \mathbb{R} . Montrer que $\{M_t, t \in \mathbb{R}_+\}$ définie par

$$M_t = f(X_t) - \int_0^t Qf(X_s) ds$$

est une martingale par rapport à la filtration $\{\mathcal{F}_t^X\}$;

- c** On reprend les notations de la deuxième partie de l'exercice précédent. Calculer $\mathbb{E}(T_F | X_0 = x)$ (pour le cas $\alpha \neq \beta$, on utilisera les résultats des deux questions précédentes avec la fonction $f(x) = x$ et le temps d'arrêt $S = \inf(T_F, t)$, puis on fera tendre t vers l'infini; pour le cas $\alpha = \beta$, on fera le même calcul, avec $f(x) = x^2$). On admettra que le résultat de la question **b** s'applique à ces deux fonctions, bien qu'elles ne soient pas bornées.

7.12 Problèmes corrigés

7.12.1 Enoncés

Problème 7.12.1. On considère à la fois la chaîne de Markov en temps discret $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ à valeurs dans $E = \mathbb{N}$, de matrice de transition

$$P = \begin{pmatrix} q & p & 0 & 0 & \dots \\ q & 0 & p & 0 & \dots \\ 0 & q & 0 & p & \dots \\ 0 & 0 & q & 0 & p\dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

et le processus markovien de sauts en temps continu $\{X_t; t \geq 0\}$ à valeurs dans $E = \mathbb{N}$, de générateur infinitésimal

$$Q = \begin{pmatrix} -p & p & 0 & 0 & \dots \\ q & -1 & p & 0 & \dots \\ 0 & q & -1 & p & \dots \\ 0 & 0 & q & -1 & p\dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

où $0 < p, q < 1$, $p + q = 1$.

On pourra dans la suite comparer la chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ et la marche aléatoire à valeurs dans \mathbf{Z} étudiée dans l'exercice 2.9.7 (pour laquelle on a montré le caractère transitoire lorsque $p \neq q$, et récurrent nul lorsque $p = q$), et remarquer que le processus $\{X_t; t \geq 0\}$ est une file d'attente $M/M/1$ comme étudiée dans le chapitre suivant.

1. La chaîne $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est-elle la chaîne incluse du processus $\{X_t; t \geq 0\}$?
2. Montrer que les deux processus $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ et $\{X_t; t \geq 0\}$ sont irréductibles.
3. Montrer que toute mesure invariante de $\{X_n; n \in \mathbb{N}\}$ est une mesure invariante de $\{X_t; t \geq 0\}$, et vice-versa. Montrer que les chaînes sont de même nature (toutes deux transitoires, ou récurrentes positives, ou récurrentes nulles).
4. Montrer que les deux chaînes sont transitoires dans le cas $p > q$.
5. Montrer que les deux chaînes sont récurrentes dans le cas $p = q = 1/2$ (on pourra utiliser la comparaison avec l'exercice 2.21.4). Calculer dans ce cas une mesure invariante (on déterminera π_1 en fonction de π_0 , puis π_2 en fonction de π_0, \dots), et en déduire que le processus est récurrent nul.
6. On se place maintenant dans le cas $p < q$. On pose $\lambda = p/q$, et on remarque que $q^{-1}(\lambda - p) = \lambda^2$. Montrer qu'il existe une probabilité géométrique invariante pour les deux chaînes (on calculera π_1 en fonction de π_0, π_2 en fonction de π_0, \dots).

La fin du problème étudie deux variantes de la chaîne en temps continu $\{X_t; t \geq 0\}$.

7. On modifie le générateur infinitésimal Q en multipliant p et q par une même constante $c > 0$. Montrer que ni la nature de la chaîne (transience, récurrence nulle ou positive), ni l'éventuelle mesure invariante n'est modifiée par la présence de la constante c . Qu'est-ce qui est modifié dans le processus ?
8. On se place dans le cas $p < q$, on utilise toujours la notation $\lambda = p/q$, et on considère maintenant le processus markovien de sauts $\{Y_t; t \geq 0\}$

de générateur infinitésimal Q' défini par :

$$Q'_{0y} \begin{cases} -p, & \text{si } y = 0; \\ p, & \text{si } y = 1; \\ 0, & \text{sinon;} \end{cases}$$

et pour $x \geq 1$:

$$Q'_{xy} \begin{cases} \lambda^x q, & \text{si } y = x - 1; \\ -\lambda^x, & \text{si } y = x; \\ \lambda^x p, & \text{si } y = x + 1; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Comparer les chaînes incluses de $\{X_t; t \geq 0\}$ et de $\{Y_t; t \geq 0\}$. Vérifier que $\{\pi_x = 1; x \in \mathbb{N}\}$ est une mesure invariante, et en déduire que $\{Y_t; t \geq 0\}$ est récurrente nulle. Expliquer pourquoi $\{Y_t\}$ met en moyenne plus de temps que $\{X_t\}$ à revenir en x , partant de x .

Problème 7.12.2. A On considère une suite aléatoire en temps discret $\{X_n; n \geq 0\}$ à valeurs dans \mathbb{N} , définie comme suit : $X_0 = x_0 \in \mathbb{N}$, et pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$X_{n+1} \begin{cases} (X_n + U_{n+1})^+, & \text{si } V_{n+1} = 1; \\ 0, & \text{si } V_{n+1} = 0; \end{cases}$$

où la suite $(U_1, V_1, U_2, V_2, \dots)$ est indépendante, et pour tout $n \geq 1$,

$$\mathbb{P}(U_n = 1) = \mathbb{P}(U_n = -1) = 1/2, \quad \mathbb{P}(V_n = 1) = 1 - \mathbb{P}(V_n = 0) = p,$$

avec $0 < p < 1$.

1. Montrer que $\{X_n; n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov irréductible à valeurs dans \mathbb{N} , dont on précisera la matrice de transition.
2. Montrer que la chaîne $\{X_n; n \geq 0\}$ est récurrente positive (on ne cherchera pas ici de probabilité invariante, on utilisera un raisonnement "probabiliste").
3. Montrer que si α est la racine de l'équation $p(1 + \alpha^2) = 2\alpha$ située dans l'intervalle $]0, 1[$, alors la probabilité géométrique π sur \mathbb{N} donnée par $\pi_x = (1 - \alpha)\alpha^x$, $x \in \mathbb{N}$, est l'unique probabilité invariante de la chaîne.

B On considère maintenant un processus markovien de sauts en temps continu $\{X_t; t \geq 0\}$ à valeurs dans \mathbb{N} , de générateur infinitésimal

$$Q = \begin{pmatrix} -p/2 & p/2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1-p/2 & -1 & p/2 & 0 & 0 & \dots \\ 1-p & p/2 & -1 & p/2 & 0 & \dots \\ 1-p & 0 & p/2 & -1 & p/2 & 0\dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \dots \end{pmatrix}.$$

Préciser la matrice de transition de sa chaîne incluse (comparer avec la chaîne de la partie **A**). Montrer que $\{X_t; t \geq 0\}$ est irréductible et récurrent. Montrer que la probabilité de la question **A 3** est invariante pour X_t . En déduire que $\{X_t; t \geq 0\}$ est récurrente positive.

Problème 7.12.3. Soit $\{X_t; t \geq 0\}$ une chaîne de Markov en temps continu à valeurs dans \mathbb{N} , de générateur infinitésimal

$$Q = \begin{pmatrix} -\mu & \mu & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \lambda & -(\lambda + \mu) & \mu & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda & -(\lambda + \mu) & \mu & 0 & \dots \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}.$$

avec $\lambda, \mu > 0$.

1. Déterminer la chaîne incluse. Montrer que $\{X_t; t \geq 0\}$ est irréductible.
2. Montrer que $\{X_t; t \geq 0\}$ est récurrente dans le cas $\lambda \geq \mu$, transitoire dans le cas $\lambda < \mu$.
3. Montrer que dans le cas $\lambda > \mu$, il existe une unique mesure invariante π de la forme donnée à la question 9 du problème 2.10.5, avec a que l'on déterminera en fonction de λ et μ .
4. Montrer que $\{X_t; t \geq 0\}$ est récurrente positive dans le cas $\lambda > \mu$, récurrente nulle dans le cas $\lambda = \mu$.

Problème 7.12.4. P désignant la matrice de transition définie au problème 2.10.6, on pose $Q = P - I$, et on considère une chaîne de Markov en temps continu $\{X_t, t \geq 0\}$ de générateur infinitésimal Q .

1. Déterminer la matrice de transition P' de la chaîne incluse.
2. Décrire les trajectoires de la chaîne $\{X_t\}$, en précisant les paramètres des lois exponentielles des temps de séjour dans les divers états.

3. Montrer que la chaîne $\{X_t\}$ est irréductible, récurrente positive. Déterminer sa probabilité invariante.
4. Déterminer la probabilité invariante de la chaîne incluse.

7.12.2 Corrigés

Corrigé du problème 7.12.1

1. Non, la chaîne $\{X_n\}$ n'est pas la chaîne incluse de $\{X_t\}$. La matrice de transition de la chaîne incluse a sa première ligne égale à $(0, 1, \dots)$, et le reste de P est le même. Il n'est pas difficile de voir que $\{X_n\}$ est irréductible comme la chaîne incluse, et qu'elle a la même propriété en terme de transience, récurrence nulle ou positive (cf. question 3). Seule la forme exacte d'une éventuelle mesure invariante est un petit peu différente.
2. Puisque $0 < p, q < 1$, aussi bien $\{X_n\}$ que la chaîne $\{Y_n\}$ incluse dans $\{X_t\}$ passe avec une probabilité positive de 0 à 1, et de x à $x - 1$ et $x + 1$, pour $x \geq 1$. Donc pour $x, y \in \mathbb{N}$, chacun des deux processus a une probabilité non nulle, partant de x , d'atteindre y en $|y - x|$ "coups". Les deux processus sont donc irréductibles sur \mathbb{N} .
3. Il est facile de voir que l'équation $\pi P = \pi$ est identique à l'équation $\pi Q = 0$, puisque $Q = P - I$. Donc toute solution d'une équation est solution de l'autre, donc $\{X_n\}$ et $\{X_t\}$ ont même mesure invariante. Le caractère transitoire ou récurrent de $\{X_t\}$ est équivalent au caractère transitoire ou récurrent de la chaîne incluse $\{Y_n\}$, qui est équivalent au caractère transitoire ou récurrent de $\{X_n\}$. En effet une chaîne de Markov $\{X_n\}$ à valeurs dans \mathbb{N} est transitoire ssi $X_n \rightarrow \infty$ quand $n \rightarrow \infty$, puisque la transience est équivalente au fait que pour tout $m \geq 1$, il existe $n(\omega, m)$ tel que $n > n(\omega, m) \Rightarrow X_n \notin \{0, 1, \dots, m\}$. Ceci dépend des lignes de la matrice de transition au delà de la m -ième, qui sont les mêmes pour les matrices de transition de $\{X_n\}$ et de $\{Y_n\}$. Enfin, une façon de distinguer entre récurrence positive et récurrence nulle est de regarder le type de mesure invariante pour la chaîne. Donc d'après ce qui précède, si $\{X_n\}$ et $\{X_t\}$ sont récurrentes, elles sont soit toutes les deux récurrentes positives, soit toutes les deux récurrentes nulles.
4. Il suffit de considérer $\{X_n\}$. Or $X_{n+1} = X_n + \mathbf{1}_{\{X_n > 0\}} Y_{n+1} + \mathbf{1}_{\{X_n = 0\}} Y_{n+1}^+$, avec X_0, Y_1, Y_2, \dots indépendantes, $\mathbb{P}(Y_k = 1) = p = 1 - \mathbb{P}(Y_k = -1)$.

Donc $X_n \geq X_0 + \sum_{k=1}^n Y_k$, et comme les Y_k sont i.i.d., avec $\mathbb{E}(Y_k) = p - q > 0$, $\sum_{k=1}^n Y_k \rightarrow +\infty$ quand $n \rightarrow \infty$, et a fortiori $X_n \rightarrow +\infty$ quand $n \rightarrow \infty$, et $\{X_n\}$ est transitoire.

5. Il suffit de montrer que $X_n \not\rightarrow \infty$ quand $n \rightarrow \infty$. Pour cela il suffit de montrer par exemple que partant de n'importe quel $x > 1$, la chaîne visite p.s. l'état $x - 1$ (et donc revient p.s. en x par irréductibilité). Comme la trajectoire de X_n entre x et $x - 1$ ne passe pas en 0, la loi du temps d'atteinte de $x - 1$ partant de x est la même que pour la marche aléatoire $\sum_1^n Y_k$, dont on sait par l'exercice 2.21.4 qu'elle est récurrente dans le cas $p = q$, donc le temps d'atteinte de $x - 1$ partant de x est p.s. fini. On pourrait argumenter que le caractère récurrent nul de $\{X_n\}$ se déduit de celui de $\sum_1^n Y_k$, mais il est tout aussi simple de remarquer que la mesure π donnée par $\pi_x = 1, \forall x \in \mathbb{N}$ est invariante pour $\{X_n\}$.
6. En résolvant l'équation $\pi Q = 0$, on trouve $\pi_1 = (p/q)\pi_0$, $\pi_2 = (\pi_1 - p\pi_0)/q = \pi_0(\lambda - p)/q = \lambda^2\pi_0$. plus généralement, on a que $\forall x \geq 1$, $\pi_{x+1} = (\pi_x - p\pi_{x-1})/q$. Donc si $\pi_x = \lambda\pi_{x-1}$, alors $\pi_{x+1} = \pi_{x-1}(\lambda - p)/q = \lambda^2\pi_{x-1} = \lambda\pi_x$. Donc par récurrence, $\pi_x = \lambda^x\pi_0$, et π est une probabilité si $\pi_0 = 1 - \lambda$, ce qui donne finalement $\pi_x = (1 - \lambda)\lambda^x$, $x \in \mathbb{N}$. Il s'agit bien d'une loi géométrique, en fait le processus considéré ici est un cas particulier de la file d'attente M/M/1, cf. la section 8.1 ci-dessous. Dans ce cas $p < q$, les chaînes sont récurrentes positives.
7. Il est facile de vérifier que tous les raisonnements ci-dessus sont inchangés par la présence de la constante c , puisque celle-ci ne modifie ni la chaîne incluse ni l'équation pour une éventuelle mesure invariante. La constante c modifie seulement la loi des temps de séjour dans chaque état, en multipliant par c le paramètre de la loi exponentielle correspondante. Si $c > 1$, on raccourcit "en loi" les temps de séjour, si $c < 1$, on les rallonge (l'espérance d'une v.a. qui suit la loi exponentielle(c) est c^{-1}).
8. On voit aisément que la chaîne incluse de $\{Y_t\}$ est la même que celle associée à $\{X_t\}$. Mais l'équation pour la mesure invariante devient $\lambda q\pi_1 = p\pi_0$, et pour $x \geq 1$, $\lambda^{x+1}p\pi_{x+1} = \lambda^x\pi_x - \lambda^{x-1}q\pi_{x-1}$, et on voit aisément que la mesure "uniforme" ($\pi_x = 1, \forall x$) est invariante. En rallongeant de plus en plus les temps de séjour dans les états "éloignés de 0" (on multiplie le paramètre de la loi exponentielle par λ^x , un facteur d'autant plus petit que x est grand), on rend l'espérance du temps de retour en x infini.

Cette dernière question donne un exemple d'un processus markovien de saut récurrent nul dont la chaîne incluse est récurrente positive. Pour un exemple dans l'autre sens (le processus en temps continu récurrent positif, la chaîne incluse récurrente nulle), il suffit de choisir $p = q = 1/2$, et de multiplier cette fois la x -ème ligne de la matrice Q par λ^{-x} , ($\lambda < 1$ comme ci-dessus). Alors la même probabilité géométrique qu'à la question **6** est invariante pour le processus en temps continu. En divisant la x -ème ligne par λ^x , on raccourcit le temps de séjour dans l'état x , le facteur λ^x étant d'autant plus petit que x est grand. On raccourcit donc la longueur des excursions partant de 0, celles-ci devenant d'espérance finie, alors même que le nombre d'états visités entre deux passages à l'état x est d'espérance infinie (la chaîne incluse est récurrente nulle).

Corrigé du problème 7.12.2 A

1. Il est assez clair d'après l'énoncé que le lemme 2.1.2 s'applique, et on a bien une chaîne de Markov. Sa matrice de transition est

$$P = \begin{pmatrix} 1 - p/2 & p/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 - p/2 & 0 & p/2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 - p & p/2 & 0 & p/2 & 0 & 0 \\ 1 - p & 0 & p/2 & 0 & p/2 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix},$$

et puisque les deux diagonales inférieures et supérieure ne contiennent pas de 0, on peut "avancer" et "reculer" d'un pas à chaque instant, donc aller en temps fini de x à y , pour tout couple d'états $x, y \in \mathbb{N}$, d'où l'irréductibilité.

2. Soit T le temps du premier retour en 0, partant de 0. $\mathbb{P}(T > k) < p^k$ pour tout $k \geq 1$. Donc

$$\mathbb{E}(T) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}(T > k) < \infty.$$

Donc l'état 0 est récurrent positif, et donc la chaîne a cette propriété, grâce à l'irréductibilité.

3. Les calculs permettent de vérifier que la probabilité π donnée dans l'énoncé satisfait $\pi P = \pi$, donc c'est une probabilité invariante, qui est unique par irréductibilité.

B La matrice de transition de la chaîne incluse diffère de la matrice P de la partie **A** uniquement par sa première ligne, qui vaut $(0\ 1\ 0\ 0\ \dots)$. Donc la chaîne incluse est irréductible, et avec les notations de la question **A 2** appliquées à la chaîne incluse, on a $\mathbb{P}(T > k) < p^{k-1}$, et donc $\mathbb{P}(T < \infty) = 1$, donc la chaîne incluse est récurrente, et $\{X_t\}$ est récurrent irréductible. Puisque $Q = P - I$, et que $\pi P = \pi$, $\pi Q = 0$, et par le théorème 7.6.2 $\{X_t\}$ est récurrent positif.

Corrigé du problème 7.12.3

1. La matrice de transition de la chaîne incluse s'écrit

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\lambda}{\lambda+\mu} & 0 & \frac{\mu}{\lambda\mu} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\lambda}{\lambda+\mu} & 0 & \frac{\mu}{\lambda+\mu} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{\lambda+\mu} & 0 & \frac{\mu}{\lambda+\mu} & 0 & \dots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Ses diagonales supérieure et inférieure ont tous leurs coefficients non nuls, donc la chaîne incluse est irréductible, et il en est de même de $\{X_t\}$.

2. Notons qu'une façon de construire la chaîne incluse $\{Z_n = X_{T_n}\}$ est de se donner des v.a. i.i.d. $\{Y_n, n \geq 1\}$ à valeurs dans $\{-1, 1\}$ t.q. $\mathbb{P}(Y_1 = 1) = \frac{\mu}{\lambda + \mu} = 1 - \mathbb{P}(Y_1 = -1)$, et de poser, pour $n \geq 0$,

$$Z_{n+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } X_n = 0 \\ Z_n + Y_n & \text{si } X_n > 0. \end{cases}$$

Le caractère récurrent ou transitoire de $\{Z_n\}$, donc aussi de $\{X_t\}$, s'établit comme dans le problème 2.10.5.

3. L'égalité $(\pi Q)_0 = 0$ entraîne que $a = \mu/\lambda$, et on vérifie aisément que ce choix de a donne bien $\pi Q = 0$.
4. D'après ce que l'on vient de voir, $\{X_t\}$ est récurrente positive si $\lambda > \mu$. Si $\lambda = \mu$, la mesure $\pi = (1, 1, 1, \dots)$ est invariante, c'est une mesure de masse infinie, donc $\{X_t\}$ est récurrente nulle.

Corrigé du problème 7.12.4

1. On a

$$Q = \begin{pmatrix} p-1 & 1-p & 0 & 0 \\ 0 & -1 & p & 1-p \\ p & 1-p & -1 & 0 \\ 0 & 0 & p & -p \end{pmatrix}, P' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 1-p \\ p & 1-p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

2. Partant de l'état 1, $\{X_t\}$ attend un temps exponentiel de paramètre $1-p$, puis passe dans l'état 2. Partant de l'état 2, $\{X_t\}$ attend un temps exponentiel de paramètre 1, puis passe dans l'état 3 avec probabilité p , dans l'état 4 avec probabilité $1-p$. Partant de l'état 3, $\{X_t\}$ attend un temps exponentiel de paramètre 1, puis passe dans l'état 1 avec probabilité p , dans l'état 2 avec probabilité $1-p$. Partant de l'état 4, $\{X_t\}$ attend un temps exponentiel de paramètre p , puis passe dans l'état 3.
3. La chaîne incluse est clairement irréductible. Puisque l'espace d'état est fini, la chaîne est alors récurrente positive. L'équation pour la probabilité invariante est $\mu Q = 0$, soit encore $\mu P' = \mu$, donc la probabilité invariante est celle du problème 2.10.6, soit π .
4. La probabilité invariante de la chaîne incluse est la probabilité solution de l'équation $\mu P' = \mu$, soit $(p/3, 1/3, 1/3, (1-p)/3)$.

Chapitre 8

Files d'attente et réseaux

Introduction

Les processus markoviens de saut servent à modéliser les files d'attente. Celles-ci ont d'abord été étudiées pour les besoins du téléphone, puis pour ceux de la recherche opérationnelle. On est passé ensuite à l'étude des réseaux de files d'attente, lesquels servent à évaluer les performances des systèmes informatiques, et aussi des systèmes de production.

Le modèle mathématique de base des files d'attente est le suivant. Des clients arrivent suivant un certain processus. Quand un client arrive, si un guichet est libre il se présente à celui-ci et commande à être servi. Sinon il se met en attente, et sera servi lorsqu'un guichet sera libre (et que les clients arrivés avant lui auront été servis - à moins qu'un système de priorités plus complexe ne soit mis en place). Les temps de service suivent une certaine loi (qui dans certains modèles plus complexes que ceux que nous allons considérer pourrait dépendre du type de client). Nous supposerons implicitement que la "salle d'attente" est de capacité infinie, et qu'aucun client n'est rejeté, sauf mention explicite du contraire.

Pour nous, la file d'attente sera caractérisée par la loi des arrivées, la loi des temps de service et le nombre de guichets disponibles. On supposera toujours les temps de service i.i.d. et indépendants du processus des arrivées.

On pourra consulter la monographie [39] pour un exposé beaucoup plus complet sur le sujet.

8.1 File d'attente M/M/1

M comme “sans mémoire” ou “markovien”. 1 est le nombre de guichets. On suppose que le processus des arrivées est un processus de Poisson d'intensité λ , et que les temps de service sont i.i.d. de loi commune la loi exponentielle (μ). Le nombre de clients présents dans le système (au guichet + en attente) est alors un processus markovien de saut à valeurs dans \mathbb{N} , de générateur infinitésimal Q donné par :

$$Q_{x,x+1} = \lambda, \quad x \in \mathbb{N}; \quad Q_{x,x-1} = \mu, \quad x \geq 1; \quad Q_{xy} = 0 \text{ si } |x - y| \geq 2;$$

et donc

$$Q_{00} = -\lambda, \quad Q_{xx} = -(\lambda + \mu), \quad x \geq 1.$$

En effet, fixons $t \geq 0$ et $x \geq 1$. Si on note $\{N_s\}$ le processus des arrivées, et S le temps d'attente à partir de t pour que le service en cours à l'instant t se termine, on a

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{t+h} = x + 1 | X_t = x) &= \mathbb{P}(N_{t+h} - N_t = 1, S > h) + o(h) \\ &= e^{-\lambda h} \lambda h e^{-\mu h} + o(h), \end{aligned}$$

$$h^{-1} P_{x,x+1}(h) \rightarrow \lambda, \quad h \rightarrow 0.$$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{t+h} = x - 1 | X_t = x) &= \mathbb{P}(N_{t+h} - N_t = 0, S \leq h) + o(h) \\ &= e^{-\lambda h} (1 - e^{-\mu h}) + o(h), \end{aligned}$$

$$h^{-1} P_{x,x-1}(h) \rightarrow \mu, \quad h \rightarrow 0.$$

On a utilisé l'indépendance du processus des arrivées et du temps de service. Si on conditionnait en outre par des valeurs passées de $\{X_s\}$ avant t , le résultat ne serait pas affecté, à cause du caractère markovien de $\{N_s\}$ et du caractère exponentiel de la loi de S (cf. exercice 6.5.1).

En outre, par le même raisonnement, pour $|y - x| \geq 2$,

$$\mathbb{P}(X_{t+h} = y | X_t = x) = o(h).$$

La file d'attente $M/M/1$ est un “processus de naissance et de mort” en temps continu, irréductible sur \mathbb{N} . Si $\lambda > \mu$, le nombre moyen d'arrivées par unité de temps est supérieur au nombre moyen de départs par unité de temps, et $X_t \rightarrow +\infty$ p.s. Le processus est transitoire.

Dans le cas $\lambda = \mu$, le processus est récurrent nul. Dans le cas $\lambda < \mu$, le processus est récurrent positif. Sa probabilité invariante est donnée par :

$$\pi_x = \left(1 - \frac{\lambda}{\mu}\right) \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^x.$$

Pour la justification de ces affirmations, voir l'exercice 8.13.1 ci-dessous. A l'équilibre, le nombre moyen de clients présents dans le système est :

$$\mathbb{E}_\pi(X_t) = \sum_{x=1}^{\infty} x\pi_x = \frac{\lambda}{\mu - \lambda}.$$

L'espérance du temps de retour en 0 est :

$$\mathbb{E}_0(R_0) = \frac{1}{q_0\pi_0} = \frac{\mu}{\lambda(\mu - \lambda)}$$

Le temps moyen entre deux périodes où le guichet est vide vaut

$$\mathbb{E}_0(R_0) - \frac{1}{q_0} = \frac{1}{\mu - \lambda}$$

Calculons le temps moyen passé par un client dans le système. Conditionnellement au fait de trouver x clients devant lui en arrivant, le temps moyen passé par un client est $(x + 1)/\mu$. Donc le temps moyen est :

$$\mathbb{E}_\pi(X_t + 1)/\mu = \frac{1}{\mu - \lambda}.$$

L'argument ci-dessus, qui peut sembler contradictoire (pourquoi l'état de la file au moment d'une arrivée est-il le même que celui de la file à un instant arbitraire ?), est correct asymptotiquement, au sens où la loi du nombre de clients que le n -ième arrivé trouve devant lui converge vers la probabilité invariante de X_t , quand $n \rightarrow \infty$, cf. l'exercice 8.13.2 ci-dessous. En outre, c'est une conséquence du Théorème qui suit, où $\{X_t\}$ désigne le nombre de clients présents dans une file d'attente non nécessairement de type M/M/1. Formulons trois hypothèses, qui sont en particulier vérifiées dans le cas markovien récurrent positif :

$$t^{-1} \int_0^t X(s) ds \rightarrow \bar{X} \text{ p.s., quand } t \rightarrow \infty, \quad (\text{H1})$$

où \bar{X} est une constante,

$$\exists \text{ une suite aléatoire } t_n \rightarrow \infty, \text{ quand } n \rightarrow \infty \text{ t. q. } X_{t_n} = 0, \quad (\text{H2})$$

et on suppose en outre que les durées de séjour de tous les clients sont finies, et que si D_n désigne la durée du séjour du n -ième client arrivé après l'instant 0, il existe une constante \bar{D} telle que

$$\bar{D} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n D_k. \quad (\text{H3})$$

Théorème 8.1.1. (*Formule de Little*) *On considère un système de service tel que le nombre moyen d'arrivées par unité de temps soit égal à λ , et qui vérifie les hypothèses (H1), (H2) et (H3) ci-dessus. Alors*

$$\bar{X} = \lambda \bar{D}.$$

PREUVE Désignons par $N(t)$ le nombre de clients arrivés avant t , et $\{t_n, n \in \mathbb{N}\}$ une suite telle que $X_{t_n} = 0, \forall n$ et $t_n \rightarrow \infty$, quand $n \rightarrow \infty$. Alors il n'est pas difficile de vérifier que si $X_0 = 0$:

$$\sum_{k=1}^{N(t_n)} D_k = \int_0^{t_n} X_s ds.$$

Donc

$$\frac{1}{t_n} \int_0^{t_n} X_s ds = \frac{N(t_n)}{t_n} \times \frac{1}{N(t_n)} \sum_1^{N(t_n)} D_k.$$

Il reste à faire tendre $n \rightarrow \infty$, en utilisant les hypothèses. Le cas $X_0 \neq 0$ s'en déduit puisque les durées de séjour des clients présents à l'instant 0 sont finies. \square

Notons que la formule de Little est très intuitive.

8.2 File d'attente M/M/1/K

En pratique, on ne peut pas en général avoir un nombre arbitraire de clients en attente. Dans le modèle $M/M/1/K$, les arrivées sont poissonniennes

d'intensité λ , les temps de service de loi exponentielle de paramètre μ , il y a un serveur, et la "salle d'attente" contient au plus K clients (dont celui en train de se faire servir). Ceci signifie que tout client qui arrive quand la salle d'attente est pleine est rejeté.

Le nombre de clients présents dans le système est alors un processus markovien de saut à valeurs dans $\{0, 1, 2, \dots, K\}$. Son générateur infinitésimal est donné par

$$\begin{aligned} Q_{x,x+1} &= \lambda, \quad 0 \leq x \leq K-1; \quad Q_{x,x-1} = \mu, \quad 1 \leq x \leq K; \\ Q_{xy} &= 0 \text{ si } |x-y| > 2. \text{ Donc en outre} \\ Q_{00} &= -\lambda, \quad Q_{xx} = -(\lambda + \mu), \quad 1 \leq x \leq K-1; \quad Q_{KK} = -\mu. \end{aligned}$$

Ce processus de Markov est irréductible, à valeurs dans un ensemble fini, donc récurrent positif. Sa probabilité invariante π se calcule aisément.

Dans le cas $\lambda \neq \mu$, on trouve

$$\pi_x = \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^x \frac{1 - \lambda/\mu}{1 - (\lambda/\mu)^{K+1}}, \quad 0 \leq x \leq K.$$

Dans le cas $\lambda = \mu$, on a $\pi_x = \frac{1}{K+1}$.

La probabilité qu'un client arrivant soit rejeté est égale à la proportion du temps où la file est pleine, soit

$$\pi_K = \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^K \frac{1 - \frac{\lambda}{\mu}}{1 - \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{K+1}} \text{ si } \lambda \neq \mu, \quad \pi_K = \frac{1}{K+1} \text{ si } \lambda = \mu.$$

8.3 File d'attente M/M/s

On revient au cas d'une "salle d'attente" de capacité infinie, mais on suppose maintenant qu'il y a s guichets ("serveurs") disponibles. Les temps de service aux différents guichets sont bien sûr mutuellement indépendants. Il n'est pas difficile de voir que :

$$Q_{01} = \lambda, \quad Q_{0x} = 0, \quad x > 1;$$

pour $1 \leq x \leq s$,

$$Q_{x,x+1} = \lambda, \quad Q_{x,x-1} = x\mu, \quad Q_{xy} = 0, \quad |x-y| > 1;$$

pour $x \geq s$,

$$Q_{x,x+1} = \lambda, Q_{x,x-1} = s\mu, Q_{xy} = 0, |x - y| > 1.$$

Le seul calcul nouveau à faire est le suivant : si S_1, \dots, S_x sont i.i.d. exponentielles (μ),

$$\mathbb{P}(S_1 \wedge \dots \wedge S_x > h) = (e^{-\mu h})^x.$$

Donc la probabilité qu'il y ait au moins un départ dans un intervalle de temps de longueur h , lorsque x guichets sont occupés, est

$$1 - e^{-x\mu h},$$

et

$$\frac{1 - e^{-x\mu h}}{h} \rightarrow x\mu.$$

En outre, la probabilité qu'il y ait au moins deux départs pendant un intervalle de temps de longueur h est un $o(h)$.

$\{X_t\}$ est récurrent positif si $\lambda < \mu s$. Dans ce cas, on peut chercher une probabilité invariante en cherchant une solution de l'équation d'équilibre ponctuel :

$$\pi_x Q_{x,x+1} = \pi_{x+1} Q_{x+1,x}.$$

On trouve que

$$\pi_x / \pi_0 \begin{cases} (\lambda/\mu)^x / x!, & \text{si } 0 \leq x \leq s; \\ (\lambda/\mu)^x / s^{x-s} s!, & \text{si } x > s. \end{cases}$$

Les deux cas qui conduisent à une formule simple sont le cas $s = 1$ (déjà traité, loi géométrique) et le cas $s = \infty$, auquel cas $\pi_0 = e^{-\lambda/\mu}$, et

$$\pi_x = e^{-\lambda/\mu} (\lambda/\mu)^x / x!,$$

i.e. la probabilité invariante est la loi de Poisson (λ/μ).

On a le **Théorème de Burke** : si $\lambda < s\mu$, à l'équilibre le processus des départs est un processus de Poisson d'intensité λ . En effet, $\{X_t\}$ est réversible par rapport à π . Donc "à l'équilibre" (i.e. sous \mathbb{P}_π), $\{X_{T-t}; 0 \leq t \leq T\}$ a même loi de $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$, et les départs de $\{X_t\}$ sont les arrivées de $\{X_{T-t}\}$.

Calculons maintenant la probabilité qu'un client arrive alors que tous les serveurs sont occupés (et donc qu'il soit mis en attente avant d'être servi).

Celle-ci est égale à la proportion du temps pendant laquelle tous les serveurs sont occupés, donc à

$$\begin{aligned}\sum_{x=s}^{\infty} \pi_x &= \pi_0 \frac{s^s}{s!} \sum_{x=s}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\mu s}\right)^x \\ &= \pi_0 \frac{(\lambda/\mu)^s}{s!} \times \frac{\mu s}{\mu s - \lambda},\end{aligned}$$

avec

$$\pi_0 = \left[\sum_{x=0}^{s-1} \frac{(\lambda/\mu)^x}{x!} + \frac{(\lambda/\mu)^s}{s!} \times \frac{\mu s}{\mu s - \lambda} \right]^{-1}.$$

La formule que nous venons d'obtenir fait partie des formules d'Erlang.

Enfin, posons nous la question de savoir ce qui est le plus efficace, du point de vue de l'utilisateur, pour faire face à des arrivées poissonniennes d'intensité 2λ : deux serveurs en parallèle, avec temps de service de loi exponentielle de paramètre μ (solution 1), ou bien un seul serveur, avec temps de service de loi exponentielle de paramètre 2μ (solution 2) ($\lambda < \mu$) ?

Calculons les temps de séjour moyen des clients dans le système, dans les deux cas. Dans la première solution, à l'équilibre la loi du nombre de clients est donnée par $\pi_0 = \frac{1 - \lambda/\mu}{1 + \lambda/\mu}$; $\pi_x = 2 \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^x \frac{1 - \lambda/\mu}{1 + \lambda/\mu}$, $x \geq 1$.

Donc le nombre moyen de clients présents dans le système vaut

$$\begin{aligned}\bar{X}_1 &= 2 \frac{1 - \lambda/\mu}{1 + \lambda/\mu} \sum_{x=1}^{\infty} x \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^x \\ &= \frac{2\lambda/\mu}{(1 - \lambda/\mu)(1 + \lambda/\mu)}\end{aligned}$$

Donc d'après la formule de Little la durée moyenne de séjour est

$$\bar{D} = \frac{\bar{X}_1}{2\lambda} = \frac{1}{(\mu - \lambda)(1 + \lambda/\mu)}$$

Dans la seconde solution,

$$\bar{D}_2 = \frac{1}{(\mu - \lambda)2}$$

Mais $1 + \lambda/\mu < 2$, donc $\bar{D}_2 < \bar{D}_1$, et la solution d'un seul serveur, avec temps de service de loi exp(2μ), est la solution préférable.

8.4 File d'attente M/M/s/s

On considère la file $M/M/s$, mais cette fois sans salle d'attente, i.e. tout client arrivant alors que les s guichets sont occupés est rejeté. C'est le modèle de fonctionnement d'un central téléphonique.

Le nombre X_t de clients dans le système à l'instant t constitue un processus de Markov à valeurs dans $\{0, 1, \dots, s\}$, avec le générateur infinitésimal :

$$Q_{01} = \lambda, \quad Q_{0x} = 0, \quad x > 1;$$

si $0 < x < s$,

$$Q_{x,x+1} = \lambda, \quad Q_{x,x-1} = x\mu, \quad Q_{xy} = 0, \quad |x - y| > 1;$$

$$Q_{s,s-1} = s\mu, \quad Q_{sy} = 0, \quad y \neq s, y \neq s - 1.$$

La probabilité invariante est la "loi de Poisson tronquée" :

$$\pi_x = \frac{(\lambda/\mu)^x}{x!} / \sum_{y=0}^s \frac{(\lambda/\mu)^y}{y!}, \quad 0 \leq x \leq s.$$

Par le théorème ergodique, la proportion du temps pendant laquelle le système est plein, qui est aussi la proportion d'appels perdus, est

$$\pi_s = \frac{(\lambda/\mu)^s}{s!} / \sum_{y=0}^s \frac{(\lambda/\mu)^y}{y!},$$

expression qui a reçu le nom de "formule d'Erlang".

8.5 Atelier de réparation

Une usine fait fonctionner s machines. Chacune d'elles tombe en panne au taux λ (l'instant de panne est une v.a. de loi exponentielle de paramètre λ). L'usine est équipée d'un atelier de réparation. Les temps de réparation sont exponentiels de paramètre μ .

Désignons par X_t le nombre de machines en état de marche à l'instant t à valeurs dans $E = \{0, 1, \dots, s\}$. $\{X_t\}$ est un processus markovien de saut.

Son générateur infinitésimal est le même que celui de la file $M/M/s/s$, mais avec λ et μ intervertis ! Donc la probabilité invariante de ce processus est

$$\pi_x = \frac{(\mu/\lambda)^x}{x!} / \sum_{y=0}^s \frac{(\mu/\lambda)^y}{y!}, \quad 0 \leq x \leq s.$$

Le taux de panne global est

$$\begin{aligned} \lambda_g &= \sum_{x=1}^s \lambda_x \pi_x \\ &= \mu \sum_{x=0}^{s-1} \frac{(\mu/\lambda)^x}{x!} / \sum_{y=0}^s \frac{(\mu/\lambda)^y}{y!} \end{aligned}$$

Le nombre moyen de machines réparées par unité de temps vaut

$$\begin{aligned} n_r &= \mu(1 - \pi_s) \\ &= \lambda_b \end{aligned}$$

8.6 Files d'attente en série

Supposons que les clients demandent deux services : ils font d'abord la queue au guichet A, puis au guichet B, dont les deux temps de service sont indépendants, le temps de service de A suivant une exponentielle (α), et celui de B une loi exponentielle (β).

Quelle est la longueur moyenne de la file au guichet B ? Notons $\{X_t\}$ le nombre de clients (en service ou en attente) au guichet A, $\{Y_t\}$ le nombre de clients au guichet B.

Les arrivées au guichet A sont supposées former un processus de Poisson d'intensité λ . Si $\lambda > \alpha$, $X_t \rightarrow \infty$, on peut admettre qu'il y a toujours des clients en A, et ils sortent suivant un processus de Poisson d'intensité α . Si $\lambda < \alpha$, d'après le théorème de Burke les départs de A forment un processus de Poisson d'intensité λ . Il est donc naturel de prétendre que le processus des arrivées en B est un processus de Poisson d'intensité $\lambda \wedge \alpha$. Donc $\{Y_t\}$ est récurrent positif ssi $\lambda \wedge \alpha < \beta$, et dans ce cas la longueur moyenne de la file en B est $\frac{\alpha \wedge \lambda}{\beta - \alpha \wedge \lambda}$. Les deux files sont récurrentes positives si $\lambda < \alpha \wedge \beta$.

Dans ce cas, à l'équilibre, le temps moyen passé par un client dans le système A+B est

$$\frac{1}{\alpha - \lambda} + \frac{1}{\beta - \lambda}.$$

8.7 File d'attente M/G/∞

Les arrivées forment encore un processus de Poisson d'intensité λ . Les temps de service sont i.i.d., de loi commune "générale", de fonction de répartition $F(t) = \mathbb{P}(T \leq t)$. Il y a une infinité de serveurs, ce qui simplifie énormément l'analyse, en évitant toute interaction entre les clients.

Le nombre de clients arrivés avant t suit une loi de Poisson de paramètre λt . Conditionnons par $N_t = n$. Si l'on énumère les n clients arrivés de façon aléatoire, alors les temps d'arrivée A_1, \dots, A_n de ces clients sont i.i.d. de loi uniforme sur $[0, t]$ (cf. exercice 6.5.4).

Pour chacun de ces clients, le service n'est pas terminé avec probabilité

$$p = \frac{1}{t} \int_0^t \mathbb{P}(T > s) ds = \frac{1}{t} \int_0^t (1 - F(s)) ds.$$

Donc la loi conditionnelle de X_t , sachant que $N_t = n$, est la loi binomiale (n, p) . Finalement

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_t = x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}(X_t = x | N_t = n) \mathbb{P}(N_t = n) \\ &= \sum_{n=x}^{\infty} C_x^n p^x (1-p)^{n-x} e^{-\lambda t} (\lambda t)^n / n! \\ &= e^{-\lambda t} \frac{(\lambda p t)^x}{x!} \sum_{n=x}^{\infty} \frac{(\lambda(1-p)t)^{n-x}}{(n-x)!} \\ &= e^{-\lambda p t} (\lambda p t)^x / x! \end{aligned}$$

Donc la loi de X_t est la loi de Poisson de paramètre $\lambda \int_0^t (1 - F(s)) ds$. Notons que

$$\int_0^{\infty} (1 - F(s)) ds = \int_0^{\infty} \mathbb{P}(T > s) ds = \mathbb{E}(T).$$

Si $\mathbb{E}(T) < \infty$, la file a comme loi limite, la loi de Poisson $(\lambda \mathbb{E}(T))$.

8.8 File d'attente M/G/1

Les clients arrivent suivant un processus de Poisson d'intensité $\lambda > 0$. Les temps de service successifs sont des v. a. i. d., indépendantes du processus des arrivées. On note ν la loi des temps de service, et L sa transformée de Laplace, i. e.

$$L(u) = \int_0^\infty e^{-ut} \nu(dt), \quad u > 0.$$

On note μ l'espérance de la probabilité ν , qui est supposée finie.

8.8.1 Une chaîne incluse

Pour tout $n \geq 0$, on note X_n le nombre de clients en attente (ou en train de se faire servir) juste après le n -ième départ. Pour $n \geq 0$,

$$X_{n+1} = X_n + Y_{n+1} - \mathbf{1}_{X_n > 0},$$

où Y_n est le nombre d'arrivées durant le service du n -ième client. Le fait que $\{X_n, n \geq 0\}$ est une chaîne de Markov résulte du

Lemme 8.8.1. *Les v. a. $\{Y_n, n \geq 1\}$ sont i. i. d., indépendantes X_0 , de loi commune de fonction génératrice*

$$A(z) = L(\lambda(1 - z)).$$

PREUVE L'indépendance par rapport à X_0 est assez claire. Soit $n \geq 1$. Notons S_i la durée du service du i -ième client.

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(z_1^{Y_1} \cdots z_n^{Y_n}) \mathbb{E}[\mathbb{E}(z_1^{Y_1} \cdots z_n^{Y_n} | S_1, \dots, S_n)] \\ &= \int_{\mathbf{R}_+^n} \mathbb{E}(z_1^{Y_1} \cdots z_n^{Y_n} | S_1 = t_1, \dots, S_n = t_n) \nu(dt_1) \cdots \nu(dt_n) \\ &= \prod_{i=1}^n \int_{\mathbf{R}_+} e^{-\lambda t_i (1 - z_i)} \nu(dt_i) \\ &= \prod_{i=1}^n L(\lambda(1 - z_i)). \end{aligned}$$

□

Il est clair que la chaîne de Markov $\{X_n\}$ à valeurs dans \mathbb{N} est irréductible. On note que

$$\rho \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}(Y_n) = \lambda\mu.$$

8.8.2 Le cas récurrent positif

Proposition 8.8.2. *Si $\rho < 1$, la chaîne $\{X_n\}$ est récurrente positive.*

PREUVE Désignons par Z_n le nombre de visites de la chaîne en 0 avant le n -ième départ. On a

$$X_n = X_0 + Y_1 + \dots + Y_n - n + Z_n.$$

Supposons la chaîne transitoire. Alors $X_n \rightarrow \infty$ p. s. quand $n \rightarrow \infty$, et $Z_n/n \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$, puisqu'il y a p. s. au plus un nombre fini de retour en 0. Mais par la loi des grands nombres,

$$n^{-1}(Y_1 + \dots + Y_n) \rightarrow \rho < 1,$$

donc

$$Y_1 + \dots + Y_n - n \rightarrow -\infty,$$

quand $n \rightarrow \infty$, ce qui contredit le fait que $X_n \geq 0$, et la chaîne est nécessairement récurrente. Prenons l'espérance dans la formule de récurrence ci-dessus. Puisque $X_n \geq 0$,

$$0 < 1 - \rho \leq n^{-1}\mathbb{E}X_0 + n^{-1}\mathbb{E}Z_n \rightarrow 1/m_0$$

quand $n \rightarrow \infty$, où m_0 est l'espérance du temps de retour en 0, d'après le théorème ergodique. Donc

$$m_0 \leq \frac{1}{1 - \rho} < \infty.$$

□

Notons π la probabilité invariante de $\{X_n\}$, et G sa fonction génératrice.

$$\begin{aligned} zG(z) &= \mathbb{E}(z^{X_{n+1}+1}) \\ &= \mathbb{E}(z^{X_n+Y_{n+1}+1_{X_n=0}}) \\ &= A(z)(\pi_0 z + G(z) - \pi_0), \end{aligned}$$

donc

$$(*) \quad (A(z) - z)G(z) = \pi_0 A(z)(1 - z).$$

Quand $z \rightarrow 1$,

$$\frac{A(z) - z}{1 - z} \rightarrow 1 - A'(1-) = 1 - \rho,$$

donc $\pi_0 = 1 - \rho$ et

$$G(z) = (1 - \rho) \frac{(1 - z)A(z)}{A(z) - z}.$$

Calculons la **longueur moyenne de la file**. Différentiant (*), on obtient

$$(A(z) - z)G'(z) + (A'(z) - 1)G(z) = (1 - \rho)[A'(z)(1 - z) - A(z)],$$

d'où en remplaçant $G(z)$ par sa valeur,

$$G'(z) = (1 - \rho)A'(z) \frac{1 - z}{A(z) - z} - (1 - \rho)A(z) \frac{(A'(z) - 1)(1 - z) + A(z) - z}{(A(z) - z)^2}.$$

Or, quand $z \rightarrow 1$,

$$\begin{aligned} \frac{(A'(z) - 1)(1 - z) + A(z) - z}{(A(z) - z)^2} &= \frac{A(z) - 1 - A'(z)(z - 1)}{(A(z) - z)^2} \\ &\simeq -\frac{1}{2}A''(z) \frac{(1 - z)^2}{(A(z) - z)^2} \\ &\rightarrow -\frac{A''(1-)}{2(1 - \rho)^2}. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\pi(X_n) &= G'(1-) \\ &= \rho + \frac{A''(1-)}{2(1 - \rho)} \\ &= \rho + \frac{\lambda^2 L''(0+)}{2(1 - \rho)} \\ &= \rho + \frac{\lambda^2 \mathbb{E}S^2}{2(1 - \rho)}, \end{aligned}$$

où S désigne le temps de service (i. e. une v. a. de loi ν).

On va maintenant calculer le **temps moyen passé par un client à attendre** pour se faire servir. Considérons la file à l'équilibre. Un client qui part a passé un temps Q à attendre, et un temps S à se faire servir. Conditionnellement au fait que $Q + S = t$, le nombre de clients qu'il laisse derrière lui suit la loi de Poisson de paramètre λt . Donc, si $M(u) = \mathbb{E}(e^{-uQ})$ désigne la transformée de Laplace de la loi de Q ,

$$\begin{aligned} G(z) &= \mathbb{E}(e^{-\lambda(Q+S)(1-z)}) \\ &= M(\lambda(1-z))L(\lambda(1-z)). \end{aligned}$$

Donc

$$M(u) = \frac{(1 - \rho)u}{u - \lambda(1 - L(u))}.$$

D'où l'on tire

$$\mathbb{E}Q = -M'(0+) = \frac{\lambda\mathbb{E}(S^2)}{2(1 - \rho)}.$$

Intéressons nous finalement à la **longueur moyenne des périodes d'activité** O , pendant laquelle le serveur est occupé. Notons

$$B(u) = \mathbb{E}(e^{-uO})$$

sa transformée de Laplace. Soit S la durée du service du premier client de la période d'activité. Conditionnellement en $S = t$,

$$O = t + O_1 + \dots + O_N,$$

où N est le nombre de clients qui arrivent pendant le service du premier client, dont la loi conditionnelle sachant que $S = t$ est la loi de Poisson de paramètre λt , et O_1, O_2, \dots sont i. i. d., de même loi que celle de O . Donc

$$\begin{aligned} B(u) &= \int_0^\infty \mathbb{E}(e^{-uO|S=t})\nu(dt) \\ &= \int_0^\infty e^{-ut} e^{-\lambda t(1-B(u))}\nu(dt) \\ &= L(u + \lambda(1 - B(u))). \end{aligned}$$

On en déduit l'espérance de O :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(O) &= \mu(1 + \lambda\mathbb{E}(O)) \\ &= \frac{\mu}{1 - \rho}. \end{aligned}$$

8.9 Réseau de Jackson ouvert

On considère un réseau constitué de N stations interconnectées. Chaque station p ($1 \leq p \leq N$) doit traiter les clients qui arrivent de l'extérieur, ainsi que ceux qui lui sont envoyés par les autres stations.

Dans le modèle de Jackson, les arrivées exogènes à la station p forment un processus de Poisson d'intensité λ_p^0 . Chaque station est une file d'attente.

Le taux avec lequel les clients quittent la station p est $\mu_p(n)$, si n clients sont à la station p . Par exemple

$$\mu_p(n) = \begin{cases} \mu_p \mathbf{1}_{\{n>0\}}, & \text{dans le cas d'un serveur } M/M/1; \\ n \wedge s_p \mu_p, & \text{dans le cas de } s \text{ guichets : file } M/M/s. \end{cases}$$

Un client quittant la station p se dirige vers la station q avec la probabilité r_{pq} ($1 \leq q \leq N$), et quitte le réseau avec la probabilité r_{p0} . On suppose pour simplifier que $r_{pp} = 0$, $1 \leq p \leq N$; cette hypothèse peut être levée sans difficulté.

Le processus $X_t = (X_t^1, \dots, X_t^N)$ des nombres de clients présents aux stations $1, \dots, N$ à l'instant t est un processus markovien de sauts à valeurs dans l'espace $E = \mathbb{N}_+^N$.

On note $e_p = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ le vecteur dont seule la p -ième coordonnée est non nulle et vaut 1.

Les seuls termes hors diagonaux non nuls du générateur infinitésimal du processus $\{X_t\}$ sont donnés par

$$\begin{cases} Q_{x, x+e_p} = \lambda_p^0, & x \in E, \quad 1 \leq p \leq N; \\ Q_{x+e_p, x} = \mu_p(x_p + 1)r_{p0}, & x \in E \quad 1 \leq p \leq N; \\ Q_{x+e_p, x+e_q} = \mu_p(x_p + 1)r_{pq}, & 1 \leq p \neq q \leq N, \quad x \in E. \end{cases}$$

On dit que le réseau est "sans capture" si pour tout $p \in \{1, \dots, N\}$, $\exists n \geq 0$, $p_1, \dots, p_n \in \{1, \dots, N\}$ tels que

$$r_{pp_1} r_{p_1 p_2} \cdots r_{p_{n-1} p_n} r_{p_n 0} > 0 \quad (8.1)$$

On considère l'équation

$$\lambda_p^0 + \sum_{q \neq p} \lambda_q r_{qp} = \lambda_p, \quad 1 \leq p \leq N; \quad (8.2)$$

d'inconnues λ_p , $1 \leq p \leq N$.

Lemme 8.9.1. *Sous l'hypothèse (8.1), l'équation (8.2) a une unique solution positive et finie.*

PREUVE Soit R la matrice $N \times N$, de coordonnées $R_{pq} = r_{pq}$. L'équation (8.2) s'écrit sous forme vectorielle

$$\lambda(I - R) = \lambda^0,$$

qui a la solution unique finie

$$\lambda^0 = \lambda K,$$

avec $K = \sum_0^{\infty} R^n$, à condition que cette série converge dans $\mathbb{R}^{N \times N}$.

Considérons la matrice markovienne

$$P = \begin{pmatrix} r_{10} & & & \\ r_{20} & & R & \\ r_{N0} & & & \\ 1 & 0 \cdots 0 & & \end{pmatrix}$$

L'hypothèse (8.1) entraîne que les états $1, 2, \dots, N$ sont transitoires pour la chaîne à valeurs dans $\{0, 1, 2, \dots, N\}$ de matrice de transition P , donc d'après l'exercice 2.9.6.

$$\sum_{n=0}^{\infty} (P^n)_{xy} < \infty, \quad 1 \leq x, y \leq N.$$

Mais $(P^n)_{xy} = (R^n)_{xy}$, $1 \leq x, y \leq N$, d'où le résultat.

On peut maintenant établir le :

Théorème 8.9.2. *Sous l'hypothèse (8.1), si en outre pour tout $1 \leq p \leq N$,*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \prod_{r=1}^n \frac{\lambda_p}{\mu_p(r)} < \infty,$$

alors le processus markovien de saut $\{X_t\}$ à valeurs dans E admet l'unique probabilité invariante

$$\pi_x = \prod_{p=1}^N \pi_{x_p}^p,$$

où pour $1 \leq p \leq N$, la probabilité π^p sur \mathbb{N} est définie par

$$\pi_n^p = b_p \frac{\lambda_p^n}{\prod_{r=1}^n \mu_p(r)},$$

$$\text{avec } b_p = \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \prod_{r=1}^n \frac{\lambda_p}{\mu_p(r)} \right)^{-1}.$$

Avant de démontrer ce théorème, précisons ce résultat dans deux cas particuliers.

Corollaire 8.9.3. Cas $\mu_p(n) = \mu_p \mathbf{1}_{\{n>0\}}$ (Réseau de files $M/M/1$). Si (8.1) est satisfaite et $\lambda_p < \mu_p$, alors le processus $\{X_t\}$ admet la probabilité invariante $\pi_x = \prod_{p=1}^N \pi_{x_p}^p$, où

$$\pi_n^p = \left(1 - \frac{\lambda_p}{\mu_p}\right) \left(\frac{\lambda_p}{\mu_p}\right)^n, \quad 1 \leq p \leq N, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Corollaire 8.9.4. Cas $\mu_p(n) = \mu_p \times (n \wedge s_p)$ (Réseau de files $M/M/s_p$). Si (8.1) est satisfaite et $\lambda_p < \mu_p s_p$, alors le processus $\{X_t\}$ admet la probabilité invariante $\pi_x = \prod_{p=1}^N \pi_{x_p}^p$, avec

$$\pi_n^p b_p \left(\frac{\lambda_p}{\mu_p}\right)^n / (n \wedge s_p)!,$$

avec

$$b_p = \left[\sum_{r=0}^{s_p-1} \frac{(\lambda_p/\mu_p)^r}{r!} + \frac{(\lambda_p/\mu_p)^{s_p}}{s_p!} \left(\frac{1}{1 - \lambda_p/\mu_p s_p} \right) \right]^{-1}$$

PREUVE DU THÉORÈME 8.9.2 : Si une probabilité invariante π existe, et si \hat{Q} désigne le générateur infinitésimal du processus retourné, alors on a :

$$\begin{aligned} \pi_x Q_{x,x+e_p} &= \pi_{x+e_p} \hat{Q}_{x+e_p,x} \\ \pi_{x+e_p} Q_{x+e_p,x} &= \pi_x \hat{Q}_{x,x+e_p} \\ \pi_{x+e_q} Q_{x+e_p,x+e_p} &= \pi_{x+e_p} \hat{Q}_{x+e_p,x+e_q}. \end{aligned}$$

Si π existe et est donnée par la formule de l'énoncé, alors

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{x+e_p,x} &= \frac{\lambda_p^0}{\lambda_p} \mu_p (x_p + 1) \\ \hat{Q}_{x,x+e_p} &= \lambda_p r_{p0} \\ \hat{Q}_{x+e_p,x+e_q} &= \frac{\lambda_q}{\lambda_p} r_{pq} \mu_p (x_p + 1) \end{aligned}$$

La formule pour π est alors correcte pourvu que pour tout $x \in E$ (cf. Remarque 7.7.3) :

$$\sum_{y \neq x} \hat{Q}_{xy} = \sum_{y \neq x} Q_{xy}$$

Or

$$\sum_{y \neq x} Q_{xy} = \sum_{p=1}^N (\lambda^0 + \mu_p(x_p)),$$

et

$$\begin{aligned} \sum_{y \neq x} \hat{Q}_{xy} &= \sum_{p=1}^N \left(\lambda_p r_{p0} + \frac{\lambda_p^0}{\lambda_p} \mu_p(x_p) + \sum_{q \neq p} \lambda_q r_{qp} \frac{\mu_p(x_p)}{\lambda_p} \right) \\ &= \sum_{p=1}^N (\lambda_p r_{p0} + \mu_p(x_p)), \end{aligned}$$

où on a utilisé l'égalité (8.2). Mais en sommant l'égalité (8.2) sur p , on obtient

$$\begin{aligned} \sum_p \lambda_p^0 &= \sum_p \lambda_p (1 - \sum_q r_{pq}) \\ &= \sum_p \lambda_p r_{p0} \end{aligned}$$

d'où l'égalité désirée. □

Il résulte de la preuve du Théorème les formules pour le générateur infinitésimal du processus retourné, d'où l'on déduit le

Corollaire 8.9.5. *Si les conditions du Théorème 8.9.2 sont satisfaites, et $\{X_t\}$ est initialisée avec la probabilité invariante, alors le processus retourné en temps $\hat{X}_t = X_{T-t}$, $0 \leq t \leq T$, est un processus markovien de saut, qui s'interprète comme un réseau de Jackson avec N files interconnectées, de paramètres :*

Intensité des arrivées exogènes à la station p :

$$\hat{\lambda}_p^0 = \lambda_p r_{p0};$$

Probabilité de routage de p vers q :

$$\hat{r}_{pq} = \frac{\lambda_q}{\lambda_p} r_{qp}$$

Probabilité de sortie du système au moment de quitter la station p :

$$\hat{r}_{p0} = \frac{\lambda_p^0}{\lambda_p}$$

Taux de service à la station p :

$$\hat{\mu}_p(x_p) = \mu_p(x_p).$$

En outre, les processus de sortie du système pour le processus initial à partir des stations $\{1, \dots, N\}$ sont des processus de Poisson indépendantes d'intensités respectives $\lambda_p r_{p0}$.

8.10 Réseau de Jackson fermé

On reprend le modèle de la section précédente, en supposant cette fois qu'il n'y a pas d'arrivée exogène – $\lambda_p^0 = 0, \forall p$, ni de sortie du système – $r_{p0} = 0, \forall p$, soit

$$r_{pp} = 0, \quad \sum_{q=1}^N r_{pq} = 1.$$

La matrice $R = (r_{pq})_{1 \leq p, q \leq N}$ est donc markovienne. On la supposera **irréductible** dans toute la suite.

Sous ces hypothèses, il y a clairement conservation du nombre de clients dans le réseau. On notera $I (> 0)$ ce nombre.

Ici le processus $\{X_t\}$ est un processus markovien de saut à valeurs dans

$$E(I) = \{x \in \mathbb{N}_+^N, x_1 + \dots + x_p = I\}.$$

Le générateur infinitésimal de $\{X_t\}$ est donné par

$$Q_{x+e_p, x+e_q} = \mu_p(x_p + 1)r_{pq}, \quad p \neq q, \quad x \in E(I).$$

Soit $\{\lambda_p, 1 \leq p \leq N\}$ la probabilité sur $\{1, \dots, N\}$ invariante par R . On montre alors, par exemple par la même méthode qu'à la section précédente, le

Théorème 8.10.1. *Si R est irréductible, alors le processus $\{X_t\}$ admet l'unique probabilité invariante*

$$\pi_x = G(I)^{-1} \prod_{p=1}^N \frac{\lambda_p^{x_p}}{\prod_{r=1}^{x_p} \mu_p(r)},$$

avec

$$G(I) = \sum_{x \in E(I)} \prod_{p=1}^N \frac{\lambda_p^{x_p}}{\prod_{r=1}^{x_p} \mu_p(r)}.$$

La principale difficulté est de calculer la constante de normalisation (aussi appelée “fonction de partition”) $G(I)$. Dès que les valeurs de I et de N ne sont pas petites, le cardinal de $E(I)$ (qui vaut C_{I+N-1}^{N-1}) rend le calcul de $G(I)$ par sommation directe impossible.

Supposons maintenant pour toute la suite de cette section que $\mu_p(r) = \mu_p \mathbf{1}_{\{r>0\}}$. Notons $\rho_p = \lambda_p / \mu_p$.

Nombre moyen de clients Soit $1 \leq k < I$. Pour tout $y \in E(I - k)$, notons que

$$\pi_{y+ke_p}^I G(I) = \pi_y^{I-k} \rho_p^k G(I - k),$$

si l'on note π^I la probabilité invariante sur $E(I)$.

Donc si $\{X_t\}$ est initialisée avec la probabilité invariante π^I , et si $1 \leq k < I$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_t^p \geq k) &= \sum_{y \in E(I-k)} \pi_{y+ke_p}^I \\ &= \frac{G(I-k)}{G(I)} \rho_p^k \sum_{y \in E(I-k)} \pi_y^{I-k} \\ &= \frac{G(I-k)}{G(I)} \rho_p^k. \end{aligned}$$

Donc

$$\mathbb{E}X_t^p = \sum_{k=1}^I \rho_p^k \frac{G(I-k)}{G(I)},$$

où $G(0) = 1$.

Intensité des arrivées A l'équilibre, l'intensité des départs de la station p vers la station q vaut :

$$d_{pq} = \sum_{x \in E(I), x_p > 0} \pi_x Q_{x, x-e_p+e_q}$$

De la bijection entre $\{x \in E(I), x_p > 0\}$ et $E(I - 1)$, et de l'identité

$$\pi_x^I G(I) = \pi_{x-e_p}^{I-1} G(I - 1) \rho_p,$$

on déduit la formule

$$d_{pq} = \frac{\lambda_p r_{pq} G(I-1)}{G(I)}.$$

On obtient alors, par un argument de retournement du temps, la formule suivante pour l'intensité des arrivées à la station p

$$a_p = \frac{\lambda_p G(I-1)}{G(I)}.$$

Calcul de la fonction de partition Considérons les fonctions génératrices

$$\Phi_p(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (\rho_p z)^n \frac{1}{1 - \rho_p z}, \quad 1 \leq p \leq N, \quad |z| \leq 1.$$

En comparant les coefficients des z^j dans les deux membres, on obtient l'égalité

$$\sum_{n=0}^{\infty} G(n) z^n = \prod_{p=1}^N \Phi_p(z)$$

Soit

$$\beta_p(z) = \prod_{q=1}^p \Phi_q(z), \quad 1 \leq p \leq N, \quad |z| \leq 1.$$

On a

$$\beta_p(z)(1 - \rho_p z) = \beta_{p-1}(z), \quad p > 1.$$

Notons $T(k, p)$ le coefficient de z^k dans $\beta_p(z)$. On a

$$T(k, p) - \rho_p T(k-1, p) = T(k, p-1), \quad k \geq 1, \quad p > 1,$$

avec $T(0, p) = 1$, $p \geq 1$ et $T(k, 1) = \rho_1^k$, $n \geq 0$.

On en déduit un algorithme de calcul de $G(I) = T(I, N)$, de complexité $O(I \times N)$, qui consiste à calculer les $T(k, p)$ ligne par ligne pour $1 \leq p \leq N$ (i.e. pour des valeurs croissantes de k).

8.11 Réseau téléphonique

On considère un réseau téléphonique constitué de N canaux interconnectés. L'établissement d'une communication requiert l'usage exclusif des n

canaux demandés pour la communication. Si un ou plusieurs des canaux demandés est occupé, l'appel est rejeté. Sinon, la communication est établie, et dure un temps aléatoire, de loi exponentielle de paramètre μ_n . Les appels demandant n canaux arrivent suivant un processus de Poisson d'intensité λ_n . Les flux d'arrivées de type différent et les durées des communications sont mutuellement indépendants.

Soit $X_t = (X_t^1, \dots, X_t^P)$ où X_t^n représente le nombre de communications établies à l'instant t , qui utilisent n canaux. X_t est un processus markovien de saut à valeurs dans

$$E = \{x = (x_1, \dots, x_P) \in \mathbb{N}^P \mid \bar{x} \leq N\},$$

où $\bar{x} = x_1 + 2x_2 + \dots + Px_P$, de générateur infinitésimal Q , dont les seuls termes hors diagonaux non nuls sont donnés par :

$$\begin{aligned} Q_{x+e_n, x} &= \mu_n \times (x_n + 1), \\ Q_{x, x+e_n} &= \lambda_n \frac{C_{N-\bar{x}}^n}{C_N^n}, \end{aligned}$$

où $e_n = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ i.e. le vecteur de E dont toutes les coordonnées sont nulles, sauf la n -ième qui vaut 1. Notons que $C_{N-\bar{x}}^n / C_N^n$ est la probabilité de non-rejet si $X_t = x$. Posons $\tau_n = (C_N^n)^{-1} \lambda_n$.

Probabilité invariante

Théorème 8.11.1. *Le processus markovien de saut $\{X_t\}$ décrit ci-dessus est réversible par rapport à sa probabilité invariante*

$$\pi_x = \pi_0 \frac{N!}{(N - \bar{x})!} \prod_{n=1}^P \left\{ \left(\frac{\tau_n}{\mu_n n!} \right)^{x_n} \frac{1}{x_n!} \right\}$$

PREUVE Cherchons une solution à l'équation d'équilibre local

$$\pi_x \tau_n \frac{(N - \bar{x})!}{n!(N - \bar{x} - n)!} = \pi_{x+e_n} \mu_n (x_n + 1), \quad x \in E, \quad 1 \leq n \leq P, \quad \bar{x} + e_n \in E;$$

Soit

$$\pi_{x+e_n} = \frac{\tau_n}{\mu_n} \frac{1}{x_n + 1} \frac{(N - \bar{x})!}{n!(N - \bar{x} - n)!} \pi_x.$$

Donc si $x_n \geq 1$,

$$\pi_x = \frac{\tau_n}{\mu_n n!} \frac{1}{x_n} \frac{(N - \bar{x} + n)!}{(N - \bar{x})!} \pi_{x - e_n}.$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \pi_x &= \pi_{x - x_1 e_1} \left(\frac{\lambda_1}{\mu_1} \right)^{x_1} \frac{1}{x_1!} \frac{(N - \bar{x} + x_1)!}{(N - \bar{x})!} \\ \pi_x &= \pi_{x - x_1 e_1 - x_2 e_2} \left(\frac{\lambda_1}{\mu_1} \right)^{x_1} \frac{1}{x_1!} \left(\frac{\lambda_2}{\mu_2} \right)^{x_2} \frac{1}{x_2!} \frac{(N - \bar{x} + x_1 + 2x_2)!}{(N - \bar{x})!} \end{aligned}$$

La formule de l'énoncé s'obtient en poursuivant ce calcul. \square

Il reste à calculer π_0 . Posons

$$y_n = \frac{\tau_n}{\mu_n n!}, \quad y = (y_1, \dots, y_P),$$

$$G(N, x) = \sum_{x \in E} \frac{N!}{(N - \bar{x})!} \prod_{n=1}^P \frac{y_n^{x_n}}{x_n!}.$$

Alors $\pi_0 = G(N, y)^{-1}$. On verra ci-dessous un algorithme de calcul de la fonction de partition $G(N, y)$.

Probabilité de rejet En régime stationnaire, l'intensité des fins de communication mettant en jeu n canaux vaut

$$\sum_{x \in E} \mu_n x_n \pi_x = \mathbb{E}(X_t^n) \mu_n.$$

La réversibilité entraîne que cette quantité est égale à l'intensité des communications mettent en jeu n canaux qui sont acceptés. Donc le rapport taux d'acceptation/taux de demande pour les communications mettant en jeu n canaux, qui représente la probabilité d'acceptation, vaut $\mathbb{E}(X_t^n) \mu_n / \lambda_n$. Il reste donc à calculer le

Nombre moyen de communications mettant en jeu n canaux.

$$\sum_{x \in E} x_n \pi_x = G(N, y)^{-1} \sum_{x \in E} \frac{N!}{(N - \bar{x})!} x_n \prod_{m=1}^P \frac{y_m^{x_m}}{x_m!}$$

Or

$$\frac{\partial}{\partial y_n} G(N, y) = \sum_{x \in E} \frac{N!}{(N - \bar{x})!} \frac{y_n^{x_n - 1}}{(x_n - 1)!} \prod_{m \neq n} \frac{y_m^{x_m}}{x_m!}$$

Donc

$$\sum_{x \in E} x_n \pi_x = y_n G(N, y)^{-1} \frac{\partial}{\partial y_n} G(N, y).$$

Avec la convention $n! = -\infty$ si $n < 0$, on a

$$\frac{\partial}{\partial y_n} G(N, y) = \sum_{x_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{x_P=0}^{\infty} \frac{N!}{(N - \bar{x})!} \frac{y_n^{x_n - 1}}{(x_n - 1)!} \prod_{m \neq n} \frac{y_m^{x_m}}{x_m!}$$

soit encore

$$\frac{\partial}{\partial y_n} G(N, y) = \frac{N!}{(N - n)!} \sum_{x_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{x_P=0}^{\infty} \frac{(N - n)!}{(N - n - \bar{x})!} \prod_m \frac{y_m^{x_m}}{x_m!},$$

donc

$$\frac{\partial}{\partial y_n} G(N, y) = \frac{N!}{(N - n)!} G(N - n, y),$$

et

$$\mathbb{E}X_t^n = \frac{\lambda_n}{\mu_n} \frac{G(N - n, y)}{G(N, y)}.$$

Probabilité de rejet (suite) La probabilité de rejet d'une communication mettant en jeu n canaux vaut donc

$$p_n = 1 - \frac{G(N - n, y)}{G(N, y)}.$$

Calcul de la fonction de partition On peut établir des équations de récurrence pour des $G(N, y)$, analogues à celles que nous avons obtenues dans le cas des réseaux de Jackson fermés.

Considérons, pour $z \in \mathbf{C}$, la fonction génératrice :

$$g(z, y) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} G(N, y),$$

avec $G(0, x) = 1$. On peut montrer que

$$g(z, y) = \exp \left[z + \sum_{n=1}^P y_n z^n \right],$$

d'où l'on déduit les formules de récurrence

$$G(0, y) = 1$$

$$G(N, y) = G(N-1, y) + \sum_{n=1}^N n y_n \frac{(N-1)!}{(N-n)!} G(N-n, y), \quad N = 1, 2, \dots, P;$$

$$G(N, y) = G(N-1, y) + \sum_{n=1}^P n y_n \frac{(N-1)!}{(N-n)!} G(N-n, y), \quad N \geq P.$$

8.12 Réseau de Kelly

On va maintenant considérer les réseaux “multiclasse”, aussi appelés “réseaux de Kelly”. La principale différence avec les réseaux de Jackson est que le trajet suivi par un client donné n'est pas le résultat de tirages aléatoires qui sont les mêmes pour tous, mais c'est un trajet déterministe qui dépend de la classe dont fait partie ce client.

Plus précisément, on considère des clients de classe $j = 1, 2, \dots, J$, où $J \in \mathbb{N}$.

Puisque les clients sont maintenant différents les uns des autres, pour étudier l'évolution des flux dans le réseau il convient de préciser le système de priorité dans chaque file, qui jusqu'à présent n'avait pas réellement d'importance (dans la mesure où l'on s'intéresse aux flux globaux, et non à ce qu'il advient d'un client particulier).

Afin de fixer les notations, considérons tout d'abord le cas de :

8.12.1 Une seule file d'attente

Les arrivées sont constituées de J flots de Poisson d'intensité respective $\lambda_1, \dots, \lambda_J$, λ_j désignant l'intensité des arrivées de clients de classe j .

Quelle que soit sa classe, un client qui arrive dans la file alors que n clients y sont déjà présents, sera placé en position ℓ ($= 1, \dots, n+1$), avec

probabilité $\gamma(\ell, n)$ [avec $\sum_{\ell=1}^{n+1} \gamma(\ell, n) = 1$].

Si n clients sont présents dans la file, le client en position ℓ reçoit un service exponentiel de paramètre $\Phi(n)\delta(\ell, n)$, avec $\sum_{\ell=1}^n \delta(\ell, n) = 1$. Globalement, le serveur travaille donc avec une “intensité” $\Phi(n) > 0$, dès que $n > 0$.

L'état de la file est décrit par un processus de Markov à valeurs dans

$$E = \emptyset \cup \bigcup_{n=1}^{\infty} \{1, \dots, J\}^n$$

Un point $c \in E$ est une suite de longueur $n = |c|$

$$c = (c_1, \dots, c_n),$$

avec $c_i \in \{1, \dots, J\}$, $1 \leq i \leq n$.

Précisons les transitions possibles de la chaîne X_t à valeurs dans E , qui décrit l'état de la file d'attente à l'instant t . Deux transitions sont possibles à partir de l'état c :

1. ajout d'un client de la classe j , inséré entre le $i - 1$ -ème et le i -ème client ($1 \leq j \leq J$, $1 \leq i \leq n + 1$, $n \geq 0$) : soit transition de l'état c à l'état

$$A_i^j(c) = (c_1, \dots, c_{i-1}, j, c_{i+1}, \dots, c_n);$$

2. départ du client qui était au rang i dans la file, soit transition de l'état c à l'état

$$S_i(c) = (c_1, \dots, c_{i-1}, c_{i+1}, \dots, c_n)$$

La matrice de transition Q est entièrement caractérisée par ses termes hors diagonaux, donnés par :

$$Q_{c, A_i^j(c)} = \lambda_j \gamma(i|c|), \quad 1 \leq i \leq |c| + 1, \quad 1 \leq j \leq J;$$

$$Q_{c, S_i(c)} = \Phi(|c|)\delta(i, |c|), \quad 1 \leq i \leq |c|.$$

Notons que la classe d'un client n'influe ni sur la façon dont il est placé dans la file, ni sur son service.

Exemple 8.12.1. File $M/M/K/PAPS(FIFO)$ (comme “premier arrivé

premier servi”, en anglais “first in first out”)

$$\begin{aligned}\Phi(n) &= n \wedge K \\ \delta(\ell, n) &= \begin{cases} 1/n \wedge K, & \text{si } 1 \leq \ell \leq n \wedge K, \\ 0 & \text{si } \ell > n \wedge K, \end{cases} \\ \gamma(\ell, n) &= \begin{cases} 0, & \text{si } \ell = 1, \dots, n \\ 1, & \text{si } \ell = n + 1 \end{cases}\end{aligned}$$

Exemple 8.12.2. File $M/M/K/DAPS(LIFO)$ (comme “dernier arrivé premier servi”, “last in first out”)

Φ et gamma sont comme dans l'exemple précédent, et cette fois

$$\delta(\ell, n) = \begin{cases} 1/n \wedge K, & \text{si } (n - K)^+ \leq \ell \leq n, \quad , n \neq 0 \\ 0, & \text{si } \ell \leq (n - K)^+ \end{cases}$$

Exemple 8.12.3. File $M/M/1/service\ partagé$ (process sharing)

$\Phi(n) = \Phi > 0$, le choix de γ est sans importance, et

$$\delta(\ell, n) = \frac{1}{n}, \quad 1 \leq \ell \leq n.$$

La chaîne de Markov $\{X_t\}$ de générateur Q ainsi précisé est clairement irréductible.

On a en outre le

Théorème 8.12.4. La file d'attente à plusieurs classes de clients est récurrente positive ssi

$$Z = \sum_{c \in E} \prod_{\ell=1}^{|c|} \frac{\lambda_{c_\ell}}{\Phi(\ell)} < \infty,$$

et dans ce cas la probabilité invariante est

$$\pi_c = Z^{-1} \prod_{\ell=1}^{|c|} \frac{\lambda_{c_\ell}}{\Phi(\ell)}, \quad c \in E.$$

En outre à l'équilibre, pour $1 \leq j \leq J$, le processus des départs des clients de la classe j est un processus de Poisson d'intensité λ_j .

PREUVE On va utiliser le théorème 7.7.4. On pose donc

$$\begin{aligned}
 \hat{Q}_{c,A_i^j(c)} &= \frac{\pi_{A_i^j(c)}}{\pi_c} Q_{A_i^j(c),c} \\
 &= \frac{\lambda_j}{\Phi(|c|+1)} \Phi(|c|+1) \delta(i, |c|+1) \\
 &= \lambda_j \delta(i, |c|+1) \\
 \hat{Q}_{c,S_i(c)} &= \frac{\Phi(|c|)}{\lambda_i} Q_{S_i(c),c} \\
 &= \frac{\Phi(|c|)}{\lambda_i} \lambda_i \gamma(i, |c|-1) \\
 &= \Phi(|c|) \gamma(i, |c|-1)
 \end{aligned}$$

On remarque que

$$\sum_{i=1}^{|c|+1} \hat{Q}_{c,A_i^j(c)} = \lambda_j = \sum_{i=1}^{|c|+1} Q_{c,A_i^j(c)}$$

et

$$\sum_{i=1}^{|c|} \hat{Q}_{c,S_i(c)} = \Phi(|c|) = \sum_{i=1}^{|c|} Q_{c,S_i(c)},$$

donc il résulte du Théorème 7.7.4 que sous l'hypothèse du présent théorème, π est la probabilité invariante, et \hat{Q} le générateur du processus retourné, et les arrivées de clients de la classe j forment un processus de Poisson d'intensité

$$\lambda_j = \sum_{i=1}^{|c|+1} \hat{Q}_{c,A_i^j(c)}. \quad \square$$

Remarquons que le nombre total de clients dans la file est un processus de Markov de naissance et de mort de générateur infinitésimal Q caractérisé par

$$Q_{i,i+1} = \sum_{j=1}^J \lambda_j; \quad Q_{i,i-1} = \Phi(i).$$

Mais la description détaillée ci-dessus va être indispensable dans ce qui suit.

8.12.2 Réseau multi-classe

On considère maintenant un réseau constitué de N noeuds, chacun étant une file d'attente du type ci-dessus. Pour chaque $1 \leq j \leq J$, les clients de la classe j arrivent dans le réseau suivant un processus de Poisson d'intensité λ_j . Chaque client de la classe j se présente d'abord à la file $f_1^j \in \{1, \dots, N\}$, puis lorsqu'il quitte cette file il rejoint la file f_2^j , et ainsi de suite jusqu'à la file $f_{n_j}^j$, d'où il quitte définitivement le réseau. C'est à dire que le j -ème flot suit la route $f_1^j, f_2^j, \dots, f_{n_j}^j$ dans le réseau. Pour chaque noeud i , $1 \leq i \leq N$, les fonctions Φ, δ, γ associées au noeud i sont notées $\Phi_i, \delta_i, \gamma_i$.

Il n'y a pas de raison d'interdire à certains des circuits $f_1^j, \dots, f_{n_j}^j$ de repasser plusieurs fois en un même noeud du réseau. Pour cette raison, et afin de rendre le système markovien, il faut associer à chaque client présent dans cette file, outre sa classe, le nombre de files déjà visitées.

L'état de la i -ème file d'attente ($1 \leq i \leq N$) est donc décrit par le vecteur

$$x_i = ((c_{i_1}, s_{i_1}), \dots, (c_{i_{m_i}}, s_{i_{m_i}}))$$

où c_{ik} désigne la classe du client à la k -ième position, et s_{ik} le nombre de files qu'il a déjà visitées (y compris celle en cours). Donc $1 \leq c_{ik} \leq J$ et $1 \leq s_{ik} \leq n_{c_{ik}}$. L'espace d'états décrivant la file au noeud i est

$$E_i = \emptyset \cup \bigcup_{n=1}^{\infty} \{1, \dots, J\}^n$$

$$X_t = (X_t^1, \dots, X_t^N), \quad \text{où}$$

$X_t^i \in E_i$ est l'état de la file au noeud i à l'instant t . Le processus markovien de sauts $\{X_t\}$ prend ses valeurs dans $E = \prod_{i=1}^N E_i$. C'est un processus irréductible.

Les transitions possibles à partir de l'état $x = (x_1, \dots, x_N)$ sont les suivantes :

1. Un client de classe j arrive, suivant un processus de Poisson d'intensité λ_j , dans le réseau au noeud f_1^j . Le couple $(j, 1)$ est inséré en ℓ -ième position dans cette file avec probabilité $\gamma_{f_1^j}(\ell, |c_{f_1^j}|)$. Ceci se produit avec l'intensité

$$\lambda_j \gamma_{f_1^j}(\ell, |c_{f_1^j}|)$$

2. Un client de classe j à l'étape $s < n_j$ de sa route, à la place ℓ de la file au noeud f_s^j , quitte celle-ci pour la place m de la file f_{s+1}^j , avec l'intensité

$$\Phi_{f_s^j}(|c_{f_s^j}|)\delta_{f_s^j}(\ell, |c_{f_s^j}|)\gamma_{f_{s+1}^j}(m, |c_{f_{s+1}^j}|).$$

A l'issue de cette transition, le couple $(j, s+1)$ est à la place m dans la file au noeud f_{s+1}^j .

3. Un client de classe j à l'étape n_j de sa route, à la place ℓ de la file au noeud $f_{n_j}^j$, quitte le réseau. Ceci se produit avec l'intensité

$$\Phi_{f_{n_j}^j}(|c_{f_{n_j}^j}|)\delta_{f_{n_j}^j}(\ell, |c_{f_{n_j}^j}|).$$

On pose

$$Z = \sum_{x \in E} \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^{|x_i|} \frac{\lambda_{c_{ik}}}{\Phi_i(k)}$$

On a le résultat suivant, qui se démontre comme le théorème précédent.

Théorème 8.12.5. *Si $Z < \infty$, alors $\{\pi_x, x \in E\}$ défini par*

$$\pi_x = Z^{-1} \prod_{i=1}^N \pi_{x_i}^i,$$

avec

$$\pi_{x_i}^i = \prod_{k=1}^{|x_i|} \frac{\lambda_{c_{ik}}}{\Phi_i(k)},$$

est la probabilité invariante du processus $\{X_t\}$ qui décrit les clients présents dans le réseau de files d'attente multiclassées. En outre, à l'équilibre, le processus de sortie des clients de classe j est un processus de Poisson d'intensité λ_j , $1 \leq j \leq J$.

8.13 Exercices

Exercice 8.13.1. *On étudie le processus de Markov $\{X_t\}$ sur \mathbb{N} qui modélise la file d'attente $M/M/1$, i.e. le processus markovien de sauts de générateur*

infinitésimal

$$Q = \begin{pmatrix} -\lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \mu & -(\lambda + \mu) & \lambda & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \mu & -(\lambda + \mu) & \lambda & 0 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

- **a** Montrer que la chaîne incluse de ce processus est la marche aléatoire réfléchie en 0 de l'exercice 2.9.10, avec $p = \lambda/(\lambda + \mu)$.
- **b** En déduire que le processus $\{X_t\}$ est transitoire dans le cas $\lambda > \mu$, récurrent dans le cas $\lambda \leq \mu$.
- **c** Montrer que $\{X_t\}$ est récurrent nul dans le cas $\lambda = \mu$, récurrent positif dans le cas $\lambda < \mu$ (on montrera que dans le premier (resp. le second) cas, la mesure $(1, 1, 1, 1, \dots)$ (resp. la mesure géométrique de paramètre λ/μ) est invariante).

Exercice 8.13.2. On considère la file $M/M/1 \{X_t, t \geq 0\}$, et on définit la suite aléatoire $\{Y_n = X_{T_n^-}, n \geq 1\}$, où $\{T_1, T_2, \dots\}$ désignent les instants d'arrivées successives de clients à partir de l'instant 0, et $X_{T_n^-} \geq 0$ est donc le nombre de clients que le n -ième arrivant trouve devant lui dans la file.

- 1 Montrer que $\{Y_n, n \geq 1\}$ est une chaîne de Markov à valeurs dans \mathbb{N} . Préciser sa matrice de transition. Montrer que cette chaîne est irréductible et apériodique.
- 2 On se place dans le cas $\lambda < \mu$. Montrer que la probabilité géométrique π de paramètre λ/μ (qui est la probabilité invariante du processus markovien de sauts $\{X_t, t \geq 0\}$), est la probabilité invariante de la chaîne $\{Y_n, n \geq 1\}$, et que la loi de Y_n converge vers π quand $n \rightarrow \infty$.
- 3 Montrer que la formule de Little dans le cas particulier de la file $M/M/1$ est une conséquence du résultat de la question précédente.
- 4 On suppose maintenant que la file est initialisée avec sa probabilité invariante (i.e. loi de $X_0 = \pi$). Calculer la loi de $X_{T_1^-}$. Montrer que pour toute fonction f croissante de \mathbb{N} dans \mathbb{R} , $\mathbb{E}f(X_{T_1^-}) \leq \sum_{x=0}^{\infty} \pi_x f(x)$, et que l'on a l'inégalité stricte pour certaines fonctions croissantes f . Ce résultat vous paraît-il conforme à l'intuition? Pourquoi la loi de $X_{T_1^-}$ diffère-t-elle de la loi π ? Comparer avec le résultat de l'exercice 6.5.3.

Chapitre 9

Introduction aux Mathématiques Financières

Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter les modèles mathématiques permettant de résoudre le problème de la fixation des prix (pricing) des options “européennes” et “américaines”, ainsi que de préciser les stratégies de couverture associées. On présentera en particulier la célèbre formule de Black et Scholes, obtenue par leurs auteurs en 1972, et qui a été un des arguments pour l’attribution récente du prix Nobel d’économie à Black et Merton (Scholes étant décédé).

On va présenter en parallèle le modèle discret de Cox, Ross et Rubinstein, et le modèle continu de Black et Scholes.

L’intérêt du modèle discret est de permettre de démontrer les résultats de façon élémentaire ; celui du modèle continu est d’aboutir aux formules qui sont celles utilisées couramment par les professionnels de la finance. On introduira les outils du calcul stochastique nécessaires, qui nous permettront de décrire les processus de diffusion, qui sont des processus de Markov en temps continu à valeurs dans \mathbb{R}^d .

Ce chapitre se termine par une introduction aux modèles de taux d’intérêt et d’obligations.

Nous nous sommes beaucoup inspirés de l’ouvrage de Lamberton, Lapeyre [27], et aussi de [2] et [32] pour la rédaction de ce chapitre.

Notation Dans ce chapitre, nous utiliserons toujours t pour désigner le temps, que celui-ci soit discret ($t = 0, 1, 2, \dots, T$ ou $t \in \mathbb{N}$) ou continu ($0 \leq t \leq T$ ou $t \geq 0$).

9.1 Les concepts de fondamentaux

Dans tout ce chapitre, on considère un investisseur qui peut répartir ses avoirs entre deux types de placement : un placement sur un compte rémunéré, avec un rendement fixe et garanti (taux d'intérêt constant), et un placement risqué en achetant des actions en bourse. Nous considérerons surtout le cas d'un seul actif risqué (excepté à la section 9.3.10). Le prix à l'instant t de cet actif sera noté S_t . Nous présenterons deux modèles probabilistes, l'un en temps discret et l'autre en temps continu, pour les fluctuations de $\{S_t\}$. Dans notre modèle, l'agent économique est seulement un investisseur, il ne consomme pas. En outre, il s'agit d'un "petit" investisseur, au sens où ses choix d'investissement n'ont pas d'effet sur l'évolution du prix de l'actif risqué. Par ailleurs, notre investisseur pourra acheter une option sur l'actif risqué.

9.1.1 Option

Une option est un contrat aux termes duquel son détenteur a le *droit* (et non l'obligation) d'acheter (s'il s'agit d'une option d'achat, *call* en anglais) ou de vendre (s'il s'agit d'une option de vente, *put* en anglais) une quantité fixée d'un actif donné (qui peut être une action, une obligation, une devise, une matière première, ...) à un prix fixé à l'avance (appelé prix d'exercice), à une date (l'échéance) fixée à l'avance dans le cas d'une option européenne ; une option américaine peut au contraire être exercée à n'importe quelle date entre celle de la signature du contrat et la date d'échéance.

Dans le cas d'un call européen d'échéance T , sur une action dont le cours à l'instant t est S_t , de prix d'exercice K , le détenteur de l'option gagne à l'instant T $(S_T - K)_+$. En effet, il gagne $S_T - K$ par action en exerçant son option si $S_T > K$ (en achetant au prix K et en revendant au prix du marché S_T), et il ne gagne ni ne perd rien en n'exerçant pas son option si $S_T \leq K$. Par un raisonnement analogue, dans le cas d'un put, le gain du détenteur de l'option à l'instant T est $(K - S_T)_+$. Le gain du détenteur (donc de l'acheteur) de l'option est la perte du vendeur de l'option. La prime est

censée compenser cette perte.

La théorie mathématique des options traite deux problèmes :

- a) fixation du prix de l'option (en anglais *pricing*), autrement dit du montant de la prime que l'acheteur de l'option devra régler à son vendeur au moment de la signature du contrat ;
- b) *couverture* : comment le vendeur de l'action va pouvoir gérer la prime qu'il encaisse au moment de la signature du contrat, pour compenser, dans le cas d'une option européenne une perte de $(S_T - K)_+$ (resp. $(K - S_T)_+$).

9.1.2 Arbitrage

Une des hypothèses que l'on est amené à faire dans l'étude mathématique des options est l'*absence d'opportunité d'arbitrage*, i.e. l'impossibilité de gagner de l'argent sans risque. Cette hypothèse entraîne une relation dite de *parité entre call et put* européens :

Proposition 9.1.1. *Si le modèle ne présente pas d'opportunité d'arbitrage, alors les prix C_t et P_t à l'instant t d'une option d'achat et d'une option de vente d'échéance T et de prix d'exercice K vérifient la relation*

$$C_t - P_t = S_t - Ke^{-r(T-t)},$$

où r est le taux d'intérêt du compte rémunéré.

Remarque 9.1.2. *Ici et dans tout ce qui va suivre, on suppose que les taux d'emprunt et de dépôt à la banque sont identiques, c'est la constante r . Cette hypothèse n'est bien sûr pas réaliste. Elle est essentielle pour que notre modèle soit linéaire, et que l'on obtienne la formule explicite de Black-Scholes. Le modèle généralisé de Black-Scholes, qui s'affranchit de cette hypothèse, sera présenté à la section 9.3.6.*

PREUVE Supposons la relation de parité non satisfaite, i.e. supposons qu'à l'instant t on ait par exemple :

$$C_t - P_t > S_t - Ke^{-r(T-t)}.$$

(un raisonnement analogue peut être fait dans le cas $<$). On va montrer qu'il existe alors une opportunité d'arbitrage. A l'instant t , on achète une action

(ou obligation, ou ...) et un put, et on vend un call. Cette opération dégage un profit net égal à :

$$X_t = C_t - P_t - S_t.$$

Si $X_t > 0$, on place X_t aux taux r jusqu'à la date T ; sinon on emprunte $-X_t$ au même taux jusqu'à la date T .

A la date T , deux cas peuvent se présenter :

1. $S_T > K$: le call est alors exercé (et on n'exerce pas le put) : on encaisse K , et on solde le prêt (ou l'emprunt), donc on se retrouve avec une richesse égale à :

$$K + e^{r(T-t)}(C_t - P_t - S_t) > 0.$$

2. $S_T \leq K$: on exerce le put (le call n'est pas exercé), et on solde comme ci-dessus, donc on se retrouve avec la même richesse que ci-dessus.

Dans les deux cas, on réalise à l'instant T un gain > 0 , avec une mise de fonds nulle à l'instant t : c'est un exemple d'arbitrage.

9.1.3 Marchés viables et complets

Un marché est dit *viable* s'il n'existe pas d'opportunité d'arbitrage.

Un marché est dit *complet* si tout actif conditionnel à l'instant T (i.e. toute fonction de $\{S_t, 0 \leq t \leq T\}$, en particulier de S_T , en particulier $(S_T - K)_+$ ou $(K - S_T)_+$) est simulable, i.e. s'il existe une stratégie admissible dont la valeur à l'instant T est égale à $(S_T - K)_+$ (resp. $(K - S_T)_+$).

La notion de stratégie admissible sera précisée ci-dessous, dans les deux modèles discret et continu. Il s'agit d'une façon de faire fructifier une certaine richesse initiale, les décisions de modification de la répartition du portefeuille entre la caisse d'épargne et le(s) support(s) risqué(s) se faisant sur la base des informations passées, la stratégie étant autofinancée, c'est à dire sans apport ni retrait d'argent. Le juste prix du call (resp. put) européen sera alors la valeur initiale d'une stratégie admissible de valeur finale $(S_T - K)_+$ (resp. $(K - S_T)_+$). Une telle stratégie réalise la *couverture de l'option*, on l'appelle stratégie de répliation. Elle permet au vendeur de l'option de se protéger (se couvrir) et de ne pas perdre d'argent (donc de ne pas non plus en gagner), quelque soient les fluctuations du marché.

9.2 Options européennes dans le modèle discret

9.2.1 Le modèle

On va considérer un modèle en temps discret avec un seul actif risqué, dont le cours à l'instant t sera noté S_t , $t = 0, 1, \dots, T$; et un actif sans risque dont le cours à l'instant t sera noté R_t .

On suppose qu'il existe $r > 0$ tel que

$$R_{t+1} = R_t(1 + r),$$

On supposera pour simplifier que $R_0 = 1$, donc

$$R_t = (1 + r)^t, \quad 0 \leq t \leq T.$$

On suppose que S_0 est une constante, et qu'il existe des v.a. i.i.d. ξ_t , $1 \leq t \leq T$, prenant leurs valeurs dans l'ensemble $\{a, b\}$, avec $0 < a < b$, telles que

$$S_{t+1} = S_t \xi_{t+1}, \quad t = 0, 1, \dots, T - 1.$$

Notre espace de probabilité est $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, avec $\Omega = \{a, b\}^T$, $\mathcal{F} = \mathcal{P}(\Omega)$, et \mathbb{P} est tel que sous \mathbb{P} les ξ_t , $1 \leq t \leq T$ sont i.i.d et $\mathbb{P}(\xi_1 = a) > 0$, $\mathbb{P}(\xi_1 = b) > 0$.

Nous définissons le *prix actualisé* à l'instant t de l'actif risqué comme la quantité

$$\tilde{S}_t = \frac{S_t}{R_t}, \quad t = 0, 1, \dots, T.$$

9.2.2 Stratégie admissible

Une *stratégie de gestion* est une suite aléatoire $\{(X_t, Y_t), t = 0, 1, \dots, T\}$ à valeurs dans \mathbb{R}^2 , telle que si

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{-1} &= \mathcal{F}_0 = \{\emptyset, \Omega\} \\ \mathcal{F}_t &= \sigma\{\xi_1, \dots, \xi_t\}, \quad t \geq 1, \end{aligned}$$

(X_t, Y_t) est \mathcal{F}_{t-1} -mesurable, pour tout $0 \leq t \leq T$. On dit que la suite $\{(X_t, Y_t)\}$ est *prévisible*.

La valeur du *portefeuille* à l'instant t est donné par :

$$V_t(X, Y) = X_t R_t + Y_t S_t,$$

et sa valeur actualisée est la quantité

$$\tilde{V}_t(X, Y) = \frac{V_t(X, Y)}{R_t} = X_t + Y_t \tilde{S}_t.$$

La stratégie est dite *autofinancée* (c'est à dire sans apport ni retrait d'argent) si

$$X_t R_t + Y_t S_t = X_{t+1} R_t + Y_{t+1} S_t$$

ou de façon équivalente

$$V_{t+1}(X, Y) - V_t(X, Y) = X_{t+1}(R_{t+1} - R_t) + Y_{t+1}(S_{t+1} - S_t)$$

ou encore

$$X_t + Y_t \tilde{S}_t = X_{t+1} + Y_{t+1} \tilde{S}_t.$$

i.e.

$$\tilde{V}_{t+1}(X, Y) - \tilde{V}_t(X, Y) = Y_{t+1}(\tilde{S}_{t+1} - \tilde{S}_t).$$

Autrement dit, avec les notations $\Delta S_t = S_t - S_{t-1}$, $\Delta \tilde{S}_t = \tilde{S}_t - \tilde{S}_{t-1}$, on a la

Proposition 9.2.1. *Les conditions suivantes sont équivalentes :*

- (i) La stratégie $\{(X_t, Y_t); 0 \leq t \leq T\}$ est autofinancée.
- (ii) Pour tout $1 \leq t \leq T$,

$$V_t(X, Y) = V_0(X, Y) + \sum_{s=1}^t (X_s \Delta R_s + Y_s \Delta S_s).$$

- (iii) Pour tout $1 \leq t \leq T$,

$$\tilde{V}_t(X, Y) = \tilde{V}_0(X, Y) + \sum_{s=1}^t Y_s \Delta \tilde{S}_s$$

On a en outre la

Proposition 9.2.2. *Pour tout processus prévisible $\{Y_t, 0 \leq t \leq T\}$ et toute valeur initiale V_0 (déterministe !) du portefeuille, il existe un unique processus prévisible $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$ tel que la stratégie $\{(X_t, Y_t), 0 \leq t \leq T\}$ soit autofinancée, et corresponde à un portefeuille de valeur initiale V_0 .*

PREUVE La condition d'autofinancement impose que, pour tout $0 \leq t \leq T$,

$$\begin{aligned}\tilde{V}_t(X, Y) &= X_t + Y_t \tilde{S}_t \\ &= V_0 + \sum_{s=1}^t Y_s \Delta \tilde{S}_s,\end{aligned}$$

ce qui définit X_t . La prévisibilité est facile à vérifier.

Définition 9.2.3. *Une stratégie (X, Y) est dite admissible si elle est autofinancée et vérifie $V_t(X, Y) \geq 0$, $\forall 0 \leq t \leq T$, i. e. si l'agent qui utilise cette stratégie reste solvable à chaque instant.*

Définition 9.2.4. *Une stratégie d'arbitrage (X, Y) est une stratégie admissible telle que $V_0(X, Y) = 0$ et $V_T(X, Y) \neq 0$, ou équivalamment $V_0(X, Y) = 0$ et $\tilde{V}_T(X, Y) \neq 0$.*

9.2.3 Martingales

Définition 9.2.5. *Une suite $\{M_t, 0 \leq t \leq T\}$ est adaptée si M_t est \mathcal{F}_t mesurable, $0 \leq t \leq T$; est une martingale si elle est adaptée et pour $1 \leq t \leq T$,*

$$\mathbb{E}[M_t | \mathcal{F}_{t-1}] = M_{t-1}.$$

Proposition 9.2.6. *Soit $\{M_t, 0 \leq t \leq T\}$ une martingale, et $\{Y_t, 0 \leq t \leq T\}$ une suite prévisible. Alors la suite $\{M(Y)_t, 0 \leq t \leq T\}$ définie par :*

$$\begin{aligned}M(Y)_0 &= Y_0 M_0 \\ M(Y)_t &= Y_0 M_0 + \sum_{1 \leq s \leq t} Y_s \Delta M_s, \quad t \geq 1\end{aligned}$$

est une martingale.

PREUVE Il suffit de remarquer que

$$\mathbb{E}[Y_t \Delta M_t | \mathcal{F}_{t-1}] = Y_t \mathbb{E}[\Delta M_t | \mathcal{F}_{t-1}] = 0,$$

où l'on a utilisé successivement le caractère prévisible de Y , et la propriété de martingale de M .

Corollaire 9.2.7. Théorème d'arrêt Soit $\{M_t, 0 \leq t \leq T\}$ une martingale, et τ un temps d'arrêt borné par T , i. e. une v. a. à valeurs dans $\{0, 1, 2, \dots, T\}$ telle que pour tout $0 \leq t \leq T$, $\{\tau = t\} \in \mathcal{F}_t$. Alors

$$\mathbb{E}M_\tau = \mathbb{E}M_0.$$

PREUVE Il suffit de remarquer que $M_\tau = M(Y)_T$, si Y est défini par

$$Y_t = \mathbf{1}_{\{\tau > t-1\}}, \quad 0 \leq t \leq T,$$

et que pour toute martingale, $\mathbb{E}M_t$ est une constante indépendante de t .

Remarque 9.2.8. La notion de martingale, bien que centrale en théorie des processus stochastiques, apparaît seulement pour la seconde fois dans ce manuel (la première apparition remonte à l'exercice 7.11.5). Comme on le voit dans cet exercice, il y a en fait un lien très fort entre la notion de processus de Markov et celle de martingale. Construire la loi d'un processus de Markov revient à résoudre un problème de martingales, c'est à dire à trouver une loi de probabilité qui fasse d'une classe importante de processus des martingales. Cependant, l'intérêt de l'introduction des martingales, qui interviennent par ailleurs très naturellement dans la description de jeux assez simples, commence réellement lorsque l'on veut démontrer des résultats difficiles, ce que l'on ne fait pas dans ce livre. Les martingales ont de nombreuses propriétés mathématiques importantes, notamment on sait estimer leurs fluctuations. Un résultat simple et profond sur les martingales est le théorème d'arrêt que nous venons de voir. Au niveau relativement élémentaire auquel nous nous plaçons dans ce chapitre, l'intervention des martingales est essentiellement motivée par le fait que le calcul de l'espérance d'une martingale à un instant $t > 0$ se ramène à celui de quantités à l'instant 0, qui sont connues.

9.2.4 Le marché est viable et complet

Théorème 9.2.9. Le marché défini ci-dessus est viable (i.e. il n'existe pas de stratégie d'arbitrage) ssi $a < 1 + r < b$.

PREUVE Il n'est pas difficile de montrer que si $1 + r \notin]a, b[$, il existe une stratégie d'arbitrage (exercice).

Réciproquement, si $a < 1 + r < b$, la probabilité \mathbb{P}^* sur (Ω, \mathcal{F}) telle que sous \mathbb{P}^* les ξ_t sont i.i.d tels que

$$\mathbb{E}^*(\xi_t) = 1 + r.$$

(appelée *probabilité risque neutre*) est équivalente à \mathbb{P} (car $\mathbb{P}^*(\xi_1 = a) > 0$ et $\mathbb{P}^*(\xi_1 = b) > 0$). Mais, sous \mathbb{P}^* , $\{\tilde{S}_t\}$ est une martingale, donc d'après la proposition 9.2.6, $\tilde{V}(X, Y)$ est une martingale pour toute stratégie (X, Y) . Donc si $V_0(X, Y) = 0$, $\mathbb{E}^*\tilde{V}_T(X, Y) = 0$. La condition d'admissibilité impose $\tilde{V}_T(X, Y) \geq 0$ p.s., donc $\tilde{V}_T(X, Y) \equiv 0$. \square

Pour alléger les notations, on posera $c = 1 + r$. Il est facile de vérifier que l'on a :

$$\mathbb{P}^*(\xi_1 = a) = \frac{b - c}{b - a}, \quad \mathbb{P}^*(\xi_1 = b) = \frac{c - a}{b - a}$$

Théorème 9.2.10. *Si $a < 1 + r < b$, le marché défini ci-dessus est complet, i.e. pour toute v.a. \mathcal{F}_T mesurable $H \geq 0$, il existe une stratégie admissible (X, Y) telle que $V_T(X, Y) = H$. En outre pour tout $0 \leq t < T$,*

$$V_t(X, Y) = \frac{R_t}{R_T} \mathbb{E}^*(H | \mathcal{F}_t).$$

PREUVE S'il existe une stratégie admissible telle que $V_T(X, Y) = H$, alors d'après la proposition 9.2.1 (iii), pour tout $0 \leq t < T$,

$$\frac{H}{R_T} = \tilde{V}_t(X, Y) + \sum_{s=t+1}^T Y_s \Delta \tilde{S}_s.$$

Par le même calcul qu'à la Proposition 9.2.6, pour $s \geq t+1$, $\mathbb{E}^*(Y_s \Delta \tilde{S}_s | \mathcal{F}_t) = 0$, donc

$$\tilde{V}_t(X, Y) = \mathbb{E}^* \left(\frac{H}{R_T} | \mathcal{F}_t \right),$$

soit encore

$$V_t(X, Y) = \frac{R_t}{R_T} \mathbb{E}^*(H | \mathcal{F}_t).$$

Notons en particulier que $H \geq 0$ entraîne alors $V_t(X, Y) \geq 0$, donc s'il existe une stratégie autofinancée qui produit la suite $\{V_t(X, Y); 0 \leq t \leq T\}$ ci-dessus, elle est admissible. Au vu de la proposition 9.2.2, il reste à montrer qu'il existe une suite prévisible $\{Y_t; 0 \leq t \leq T\}$ telle que

$$\sum_{s=1}^T Y_s \Delta \tilde{S}_s = \frac{H}{R_T} - \mathbb{E}^* \left(\frac{H}{R_T} \right).$$

En prenant successivement $\mathbb{E}^*(\cdot|\mathcal{F}_t)$ et $\mathbb{E}^*(\cdot|\mathcal{F}_{t-1})$ dans cette formule, puis ladiﬀérence entre les deux expressions ainsi obtenues, on note que Y_t doit vériﬁer (rappelons que $\tilde{S}_t = \tilde{S}_{t-1}\xi_t/c$)

$$Y_t \tilde{S}_{t-1} \left(\frac{\xi_t}{c} - 1 \right) = \mathbb{E}^*(\tilde{H}|\mathcal{F}_t) - \mathbb{E}^*(\tilde{H}|\mathcal{F}_{t-1}),$$

où $\tilde{H} := H/R_T$, soit

$$Y_t = \frac{c(\mathbb{E}^*(\tilde{H}|\mathcal{F}_t) - \mathbb{E}^*(\tilde{H}|\mathcal{F}_{t-1}))}{\tilde{S}_{t-1}(\xi_t - c)}.$$

Il reste donc à montrer que Y_t est \mathcal{F}_{t-1} -mesurable (i.e. ne dépend pas de $\xi_t!$).

Notons $\xi^{t-1} := (\xi_1, \dots, \xi_{t-1})$. Alors la v.a. $\frac{\mathbb{E}^*(\tilde{H}|\mathcal{F}_t)}{\tilde{S}_{t-1}}$ est une fonction du couple (ξ^{t-1}, ξ_t) .

Posons

$$g_t(\xi^{t-1}, \xi_t) := c \frac{\mathbb{E}^*(\tilde{H}|\mathcal{F}_t)}{\tilde{S}_{t-1}}.$$

On a

$$Y_t = \frac{g_t(\xi^{t-1}, \xi_t) - \mathbb{E}^*(g_t(\xi^{t-1}, \xi_t)|\mathcal{F}_{t-1})}{\xi_t - c}.$$

Notons que

$$\mathbb{E}^*(g_t(\xi^{t-1}, \xi_t)|\mathcal{F}_{t-1}) = g_t(\xi^{t-1}, a) \frac{b-c}{b-a} + g_t(\xi^{t-1}, b) \frac{c-a}{b-a},$$

donc

$$Y_t = \frac{(g_t(\xi^{t-1}, \xi_t) - g_t(\xi^{t-1}, a)) \frac{b-c}{b-a} + (g_t(\xi^{t-1}, \xi_t) - g_t(\xi^{t-1}, b)) \frac{c-a}{b-a}}{\xi_t - c},$$

donc dans les deux cas $\xi_t = a$ et $\xi_t = b$, on a :

$$Y_t = \frac{g_t(\xi^{t-1}, b) - g_t(\xi^{t-1}, a)}{b-a}.$$

Remarque 9.2.11. La dernière formule donne la fraction de la richesse à investir dans l'actif risqué, à chaque instant t , pour réaliser une stratégie de couverture. Notons la forme particulière du membre de droite, qui s'apparente à une "dérivée approchée". Dans le cas du modèle continu du chapitre suivant, on aura une dérivée, d'où la terminologie "produit dérivé" utilisée pour désigner les options.

9.2.5 Prix du call et du put

Nous allons maintenant préciser la formule pour $V_t(X, Y)$ dans les deux cas du call et du put. Notons

$$p = \frac{b - c}{b - a} = \mathbb{P}^*(\xi_1 = a),$$

donc

$$1 - p = \mathbb{P}^*(\xi_1 = b).$$

Dans le cas du call européen,

$$V_t(X, Y) = c^{-(T-t)} \mathbb{E}^* \left[(S_t \prod_{s=t+1}^T \xi_s - K)_+ | \mathcal{F}_t \right].$$

Mais pour tout $0 \leq k \leq T - t$, avec la notation $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$,

$$\mathbb{P}^* \left(\prod_{s=t+1}^T \xi_s = a^k b^{T-t-k} \right) = C_{T-t}^k p^k (1-p)^{T-t-k}.$$

Donc

$$V_t(X, Y) = c^{-(T-t)} \sum_{k=0}^{T-t} C_{T-t}^k p^k (1-p)^{T-t-k} (S_t k - K)_+,$$

et dans le cas du put européen,

$$V_t(X, Y) = c^{-(T-t)} \sum_{k=0}^{T-t} C_{T-t}^k p^{k(1-p)^{T-t-k}} (K - S_t k)_+.$$

9.2.6 La formule de Black–Scholes

Nous allons maintenant établir les formules du modèle continu qui sera présenté à la section 9.3, à savoir la formule de Black–Scholes, par passage à la limite sur le modèle discret, avant de la réobtenir plus loin directement à partir du modèle continu.

On suppose maintenant que, T étant un réel positif arbitraire, t prend les valeurs

$$0, \frac{1}{N}, \dots, \frac{[NT]}{N},$$

et que

$$S_t = S_0 \prod_{k=1}^{[Nt]} \xi_k^N$$

$$\tilde{S}_t = S_0 \exp \left(\sum_{k=1}^{[Nt]} \eta_k^N \right),$$

avec

$$\eta_k^N = \log \xi_k^N - \frac{r}{N}.$$

On suppose que les η_k^N prennent leurs valeurs dans l'ensemble $\{-\frac{\sigma}{\sqrt{N}}, \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\}$. Cela signifie, par rapport aux notations ci-dessus, que (les indices supérieurs N ne sont pas des exposants!) :

$$c^N = \exp(r/N), \quad a^N = \exp(r/N - \sigma/\sqrt{N}), \quad b^N = \exp(r/N + \sigma/\sqrt{N}).$$

La formule pour le prix du call (resp. du put) devient donc, si $Z_t^N := \sum_{k=1}^{[Nt]} \eta_k^N$,

$$\mathbb{E}^* \left[(S_0 \exp(Z_T^N) - K e^{-rT})_+ \right]$$

(resp.

$$\mathbb{E}^* \left[(K e^{-rT} - S_0 \exp(Z_T^N))_+ \right]).$$

Il reste à trouver la loi limite de Z_T^N quand $N \rightarrow \infty$ sous \mathbb{P}^* . On a le

Théorème 9.2.12. *Si $Z_t^N := \sum_{k=1}^{[Nt]} \eta_k^N$ et pour chaque N les $\{\eta_k^N, k \geq 0\}$ sont i.i.d. à valeurs dans $\{-\frac{\sigma}{\sqrt{N}}, \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\}$, avec $\mathbb{E}\eta_k^N = \lambda_N$, et $N\lambda_N \rightarrow \lambda$ quand $N \rightarrow \infty$, alors sous \mathbb{P} , quand $N \rightarrow \infty$,*

$$Z_t^N \Rightarrow \lambda t + \sigma B_t, \quad t \geq 0,$$

où $\{B_t, t \geq 0\}$ est un mouvement brownien, cf. la définition 9.3.1 ci-dessous.

PREUVE On sait (cf. par exemple [6] page 180) que si une v.a.r. X admet un moment d'ordre 3, pour tout $r \in \mathbb{R}$,

$$\mathbb{E}(\exp(irX)) = 1 + ir\mathbb{E}(X) - \frac{r^2}{2}\mathbb{E}(X^2) - i\frac{r^3}{6}(\mathbb{E}(X^3) + \delta(X, r)),$$

avec $|\delta(X, r)| \leq 3\mathbb{E}(|X|^3)$. Donc

$$\mathbb{E}(\exp(ir\eta_k^N)) = 1 + ir\lambda_N - \frac{r^2\sigma^2}{2N} + O(N^{-3/2}),$$

donc

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\exp(irZ_t^N)) &= \left(1 + ir\lambda_N - \frac{r^2\sigma^2}{2N} + O(N^{-3/2})\right)^{[Nt]} \\ &\rightarrow \exp\left(ir\lambda t - \frac{r^2\sigma^2 t}{2}\right). \end{aligned}$$

quand $N \rightarrow \infty$. On reconnaît la fonction caractéristique au point r de la loi normale $N(\lambda t, \sigma^2 t)$, qui est la loi de $\lambda t + \sigma B_t$, puisque la loi de B_t est la loi $N(0, t)$. \square

Pour pouvoir appliquer ce théorème, il nous reste à calculer l'espérance de η_k^N sous \mathbb{P}^* . Cette dernière probabilité est caractérisée par l'identité

$$\mathbb{E}^* \exp(\eta_k^N) = 1,$$

soit, avec $p_a := \mathbb{P}^*(\eta_k^N = -\frac{\sigma}{\sqrt{N}})$,

$$\exp(-\frac{\sigma}{\sqrt{N}})p_a + \exp(\frac{\sigma}{\sqrt{N}})p_b = 1,$$

d'où

$$p_a = \frac{e^{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} - 1}{e^{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} - e^{-\frac{\sigma}{\sqrt{N}}}}, \quad p_b = \frac{1 - e^{-\frac{\sigma}{\sqrt{N}}}}{e^{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} - e^{-\frac{\sigma}{\sqrt{N}}}},$$

et

$$\mathbb{E}^* \eta_k^N = -\frac{\sigma^2}{2N} + o\left(\frac{1}{N}\right).$$

Il résulte alors du théorème 9.2.12 que sous \mathbb{P}^* ,

$$Z_t^N \Rightarrow -\frac{\sigma^2}{2}t + \sigma B_t.$$

On en déduit la formule limite pour le prix du call :

$$C_0 = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(S_0 e^{-\frac{\sigma^2 T}{2} + \sigma \sqrt{T} y} - K e^{-rT} \right)_+ e^{-y^2/2} dy,$$

et celle du put

$$P_0 = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(K e^{-rT} - S_0 e^{-\frac{\sigma^2 T}{2} + \sigma \sqrt{T} y} \right)_+ e^{-y^2/2} dy.$$

Ces formules se réécrivent comme suit en fonction de la fonction de répartition F de la loi normale centrée réduite.

$$\begin{aligned} C_0 &= S_0 F(d_1) - K e^{-rT} F(d_2), \\ P_0 &= K e^{-rT} F(-d_2) - S_0 F(-d_1), \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} d_1 &= \frac{1}{\sigma \sqrt{T}} \log \left(\frac{S_0}{K} \right) + \frac{r \sqrt{T}}{\sigma} + \frac{\sigma \sqrt{T}}{2}, \\ d_2 &= \frac{1}{\sigma \sqrt{T}} \log \left(\frac{S_0}{K} \right) + \frac{r \sqrt{T}}{\sigma} - \frac{\sigma \sqrt{T}}{2}. \end{aligned}$$

Notons que l'on retrouve bien la parité call-put, en remarquant que $F(d_i) + F(-d_i) = 1$, $i = 1, 2$.

9.3 Le modèle et la formule de Black-Scholes

On va maintenant considérer un modèle où le cours du sous-jacent S_t varie en temps continu, $t \in \mathbb{R}_+$, et le cours S_t prend ses valeurs lui aussi dans \mathbb{R}_+ .

9.3.1 Introduction au calcul stochastique

Toutes les v.a. et les processus qui suivent seront définis sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.

Le modèle de Black-Scholes stipule que

$$S_t = S_0 \exp(\lambda t + \sigma B_t),$$

ce qui d'après la formule d'Itô du Théorème 9.3.4 ci-dessous résulte de

$$dS_t = \mu S_t dt + \sigma S_t dB_t,$$

avec $\lambda = \mu - \sigma^2/2$, où $\mu \in \mathbb{R}$ est le coefficient de *dérive* et $\sigma \in \mathbb{R}$ est appelée la *volatilité*. $\{B_t, t \geq 0\}$ est un *mouvement brownien (standard)*.

Définition 9.3.1. *Un processus stochastique $\{B_t, t \geq 0\}$ est appelé mouvement brownien si ses trajectoires sont continues, $B_0 = 0$ et*

- (i) *pour tout $n \in \mathbb{N}$, $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n$, la suite $B_{t_1}, B_{t_2} - B_{t_1}, \dots, B_{t_n} - B_{t_{n-1}}$ est une suite de v.a. indépendantes ;*
- (ii) *pour tout $0 \leq s < t$, la loi de $B_t - B_s$ est la loi $N(0, t - s)$.*

On en déduit que le processus $\{\log \left(\frac{S_t}{S_0} \right), t \geq 0\}$ est à accroissements indépendants (i.e. possède lui aussi la propriété (i) de la définition), et que pour $0 \leq s < t$, la loi de $\log \frac{S_t}{S_s}$ est la loi $N(\lambda(t - s), \sigma^2(t - s))$. Le processus $\{S_t\}$ est appelé *mouvement brownien géométrique*.

Une propriété fondamentale du mouvement brownien est donnée par la

Proposition 9.3.2. *Soit $t > 0$, et $0 = t_0^n < t_1^n < \dots < t_n^n = t$ une suite de subdivisions de l'intervalle $[0, t]$ telle que $\sup_{k \leq n} (t_k^n - t_{k-1}^n) \rightarrow 0$, quand $n \rightarrow \infty$.*

Alors

$$\sum_{k=1}^n (B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \rightarrow t,$$

en moyenne quadratique, quand $n \rightarrow \infty$.

PREUVE On a

$$\mathbb{E} \sum_{k=1}^n (B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 = t.$$

Or

$$\begin{aligned} \text{Var} \left(\sum_{k=1}^n (B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \right) &= \sum_{k=1}^n \text{Var} \left[(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \right] \\ &= 2 \sum_{k=1}^n (t_k^n - t_{k-1}^n)^2 \\ &\leq 2t \sup_{k \leq n} (t_k^n - t_{k-1}^n) \\ &\rightarrow 0, \end{aligned}$$

quand $n \rightarrow \infty$. □

Ce résultat indique que les trajectoires du mouvement brownien sont très irrégulières. Si elles étaient dérivables (avec une dérivée intégrable), la limite ci-dessus ne serait pas t mais 0 (exercice). Malgré cela, on va définir une *intégrale stochastique* du type

$$\int_0^t \varphi_s dB_s, \quad t \geq 0,$$

(que l'on ne peut pas écrire $\int_0^t \varphi_s \frac{dB_s}{ds} ds$, parce que la dérivée $\frac{dB_s}{ds}$ n'existe pas). On distinguera deux types d'intégrale stochastique

1. L'intégrale de *Wiener*, dans le cas où l'intégrand φ est déterministe ;
2. L'intégrale d'*Itô*, dans le cas où l'intégrand φ est un processus stochastique.

Commençons par construire l'intégrale de *Wiener*. On considère une fonction $\{f(s); 0 \leq s \leq T\}$ *déterministe*, telle que

$$\int_0^T f^2(s) ds < \infty.$$

On définit alors *l'intégrale de Wiener*

$$\int_0^t f(s) dB_s, \quad \text{pour } 0 \leq t \leq T.$$

Supposons tout d'abord que f est en escalier, c'est à dire

$$f(s) = \sum_{k=1}^n f_k \mathbf{1}_{]t_k, t_{k+1}]}$$

avec $0 \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n \leq T$. Alors une définition naturelle de l'intégrale de Wiener est

$$\int_0^t f(s) dB_s = \sum_{k=1}^n f_k (B_{t \wedge t_{k+1}} - B_{t \wedge t_k})$$

On déduit aisément des propriétés du mouvement brownien que :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \int_0^t f(s) dB_s &= 0 \\ \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t f(s) dB_s \right)^2 \right] &= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^n f_k (B_{t \wedge t_{k+1}} - B_{t \wedge t_k}) \right]^2 \\ &= \sum_{k=1}^n f_k^2 (t \wedge t_{k+1} - t \wedge t_k) \\ &= \int_0^t f^2(s) ds. \end{aligned}$$

La formule d'isométrie

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^t f(s) dB_s \right)^2 \right] = \int_0^t f^2(s) ds$$

permet d'étendre la définition de l'intégrale de Wiener, des fonctions en escalier à toutes les fonctions de carré intégrable. On vérifie aisément que le processus

$$\left\{ \int_0^t f(s) dB_s, \quad 0 \leq t \leq T \right\}$$

est un processus gaussien, à accroissements indépendants, de moyenne nulle, et qu'il vérifie

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^t f(s) dB_s \right)^2 \right] = \int_0^t f^2(s) ds, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Nous allons maintenant présenter la construction de l'intégrale d'Itô. Pour cela, il nous faut introduire la filtration du mouvement brownien :

$$\mathcal{F}_t \triangleq \mathcal{F}_t^B = \sigma\{B_s; 0 \leq s \leq t\} \vee \mathcal{N},$$

i.e. \mathcal{F}_t est la plus petite tribu qui rend mesurables toutes les v.a. B_s , pour $0 \leq s \leq t$, et qui contient en outre les ensembles de \mathbb{P} -mesure nulle de la tribu \mathcal{F} .

Notons $M^2(0, T)$ le sous-espace de Hilbert de

$$L^2(\Omega \times [0, T], \mathcal{F} \otimes B([0, T]), d\mathbb{P} \times dt)$$

des classes d'équivalence des processus $\{\varphi_t(\omega), \omega \in \Omega, 0 \leq t \leq T\}$ de carré intégrable, qui sont tels que pour tout $0 \leq t \leq T$, la v.a. φ_t est \mathcal{F}_t mesurable. On dit qu'un tel processus $\{\varphi_t\}$ est *adapté*.

La construction que nous avons faite de l'intégrale de Wiener s'étend à l'intégrale d'Itô comme suit. On considère tout d'abord des processus de la forme

$$\varphi_s(\omega) = \sum_{k=1}^n \varphi_k(\omega) \mathbf{1}_{]t_k, t_{k+1}]}(s),$$

où φ_k est supposée \mathcal{F}_{t_k} mesurable et de carré intégrable, $1 \leq k \leq n$. Pour un tel φ ,

$$\int_0^t \varphi_s dB_s \triangleq \sum_{k=1}^n \varphi_k (B_{t \wedge t_{k+1}} - B_{t \wedge t_k}).$$

On va utiliser de façon répétée le fait suivant qui résulte de la propriété (i) du mouvement brownien et de la définition de \mathcal{F}_t (exercice) : $\forall 0 \leq s < t$, \mathcal{F}_s et $B_t - B_s$ sont indépendants. Alors

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \int_0^t \varphi_s dB_s &= \sum_{k=1}^n \mathbb{E} \varphi_k \mathbb{E}(B_{t \wedge t_{k+1}} - B_{t \wedge t_k}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t \varphi_s dB_s \right)^2 \right] &= \sum_k \mathbb{E} \left[\varphi_k^2 (B_{t \wedge t_{k+1}} - B_{t \wedge t_k})^2 \right] \\ &\quad + 2 \sum_{\ell < k} \mathbb{E} \left[\varphi_\ell (B_{t \wedge t_{\ell+1}} - B_{t \wedge t_\ell}) \varphi_k (B_{t \wedge t_{k+1}} - B_{t \wedge t_k}) \right] \\ &= \sum_k \mathbb{E}(\varphi_k^2) (t \wedge t_{k+1} - t \wedge t_k) \\ &= \mathbb{E} \int_0^t \varphi_s^2 ds. \end{aligned}$$

A nouveau, la propriété d'isométrie que nous venons d'établir permet d'étendre l'intégrale d'Itô à tout $\varphi \in M^2[0, T]$.

On a le

Théorème 9.3.3. *Pour tout $\varphi \in M^2[0, T]$, $0 \leq t \leq T$, l'intégrale d'Itô vérifie*

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \int_0^t \varphi_s dB_s &= 0, \\ \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t \varphi_s dB_s \right)^2 \right] &= \mathbb{E} \int_0^t \varphi_s^2 ds. \end{aligned}$$

En outre le processus $\{\int_0^t \varphi_s dB_s, 0 \leq t \leq T\}$ est une martingale, puisque si $0 < s < t$,

$$\mathbb{E} \left[\int_0^t \varphi_r dB_r \mid \mathcal{F}_s \right] = \int_0^s \varphi_r dB_r.$$

Nous admettons que l'on peut étendre l'intégrale d'Itô à des $\{\varphi_t\}$ adaptés qui vérifient seulement

$$\int_0^T \varphi_t^2 dt < \infty \text{ p. s.}$$

Cependant, pour un tel $\{\varphi_t\}$ on ne sait pas a priori si la v.a. $\int_0^t \varphi_s dB_s$ est intégrable, et les trois formules du théorème 9.3.3 n'ont plus de raison d'être vraies. On a cependant toujours l'inégalité (exercice)

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^t \varphi_s dB_s \right)^2 \right] \leq \mathbb{E} \int_0^t \varphi_s^2 ds$$

Nous pouvons maintenant établir la *formule d'Itô* :

Théorème 9.3.4. *Si $\Phi \in C^{1,2}(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R})$, alors pour tout $t > 0$,*

$$\begin{aligned} \Phi(t, B_t) &= \Phi(0, B_0) + \int_0^t \Phi'_s(s, B_s) ds \\ &\quad + \int_0^t \Phi'_x(s, B_s) dB_s + \frac{1}{2} \int_0^t \Phi''_{xx}(s, B_s) ds. \end{aligned}$$

Remarque 9.3.5. *Le terme $\frac{1}{2}\Phi''_{xx}$ est nouveau par rapport aux formules du calcul différentiel usuel. Sa présence est liée au caractère très irrégulier des trajectoires du mouvement brownien, plus précisément au résultat de la Proposition 9.3.2.*

PREUVE Pour simplifier, on va considérer seulement le cas d'une fonction $\Phi \in C_b^2(\mathbb{R})$ et on va montrer qu'alors

$$\Phi(B_t) = \Phi(0) + \int_0^t \Phi'(B_s)dB_s + \frac{1}{2} \int_0^t \Phi''(B_s)ds.$$

Posons $t_k^n = \frac{k}{n}t$, $n \in \mathbb{N}$, $0 \leq k \leq n$. Alors

$$\begin{aligned} \Phi(B_t) - \Phi(0) &= \sum_{k=1}^n (\Phi(B_{t_k^n}) - \Phi(B_{t_{k-1}^n})) \\ &= \sum_{k=1}^n \Phi'(B_{t_{k-1}^n})(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \Phi''(\Theta_k^n)(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \end{aligned}$$

par la formule de Taylor à l'ordre 2, avec Θ_k^n appartenant à l'intervalle $[B_{t_{k-1}^n}, B_{t_k^n}]$. Il résulte de la formule d'isométrie de l'intégrale d'Itô que

$$\begin{aligned} &\mathbb{E} \left(\left| \int_0^t \Phi'(B_s)dB_s - \sum_{k=1}^n \Phi'(B_{t_{k-1}^n})(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n}) \right|^2 \right) \\ &= \mathbb{E} \sum_{k=1}^n \int_{t_{k-1}^n}^{t_k^n} |\Phi'(B_s) - \Phi'(B_{t_{k-1}^n})|^2 ds \\ &\rightarrow 0 \text{ par convergence dominée.} \end{aligned}$$

On remarque ensuite que

$$\begin{aligned} &\left| \sum_{k=1}^n (\Phi''(B_{t_{k-1}^n}) - \Phi''(\Theta_k^n))(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \right| \\ &\leq \sup_k |\Phi''(B_{t_{k-1}^n}) - \Phi''(\Theta_k^n)| \sum_{k=1}^n (B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \\ &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

en probabilité, quand $n \rightarrow \infty$, puisque

$$\sup_k |\Phi''(B_{t_{k-1}^n}) - \Phi''(\Theta_k^n)| \rightarrow 0, \text{ et } \sum_{k=1}^n (B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \rightarrow t.$$

Enfin une variante de l'argument de la preuve de la Proposition 9.3.2 permet de montrer que

$$\sum_{k=1}^n \Phi''(B_{t_{k-1}^n})(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 \rightarrow \int_0^t \Phi''(B_s) ds,$$

quand $n \rightarrow \infty$. Plus précisément, on montre d'une part que

$$\mathbb{E} \left[\left(\sum_{k=1}^n \Phi''(B_{t_{k-1}^n}) \left[(B_{t_k^n} - B_{t_{k-1}^n})^2 - (t_k^n - t_{k-1}^n) \right] \right)^2 \right] \rightarrow 0,$$

et d'autre part que

$$\sum_{k=1}^n \Phi''(B_{t_{k-1}^n})(t_k^n - t_{k-1}^n) \rightarrow \int_0^t \Phi''(B_s) ds.$$

□

La formule d'Itô se généralise comme suit.

On appelle *processus d'Itô* un processus $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$ de la forme

$$X_t = x + \int_0^t \psi_s ds + \int_0^t \varphi_s dB_s, \quad (9.1)$$

où $x \in \mathbb{R}$, ψ et φ sont des processus adaptés tels que

$$\int_0^T (|\psi_t| + |\varphi_t|^2) dt < \infty \text{ p.s.}$$

On a alors le résultat suivant, dont la preuve est analogue à celle du Théorème 9.3.4 :

Théorème 9.3.6. *Si $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$ est un processus d'Itô de la forme (9.1), et $\Phi \in C^{1,2}(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R})$, alors pour tout $t > 0$,*

$$\begin{aligned} \Phi(t, X_t) &= \Phi(0, x) + \int_0^t \Phi'_s(s, X_s) ds \\ &+ \int_0^t \Phi'_x(s, X_s) \psi_s ds + \int_0^t \Phi'_x(s, X_s) \varphi_s dB_s \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^t \Phi''_{xx}(s, X_s) \varphi_s^2 ds. \end{aligned}$$

On aura besoin de la formule d'Itô multidimensionnelle : on considère un mouvement brownien $\{B_t, t \geq 0\}$ à valeurs dans \mathbb{R}^k (dont les coordonnées sont k mouvements browniens réels mutuellement indépendants), ψ_t adapté à valeurs dans \mathbb{R}^d , φ_t adapté à valeurs dans $\mathbb{R}^{d \times k}$. Alors si $x \in \mathbb{R}^d$, le processus

$$X_t = x + \int_0^t \psi_s ds + \int_0^t \varphi_s dB_s, \quad 0 \leq t \leq T$$

est un processus d'Itô à valeurs dans \mathbb{R}^d .

Si maintenant $\Phi \in C^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$, on a la formule d'Itô :

$$\begin{aligned} \Phi(t, X_t) &= \Phi(0, x) + \int_0^t \Phi'_s(s, X_s) ds + \int_0^t \langle \Phi'_x(s, X_s), \psi_s \rangle ds \\ &\quad + \int_0^t \langle \Phi'_x(s, X_s), \varphi_s dB_s \rangle + \frac{1}{2} \int_0^t \text{Tr}[\Phi''_{xx}(s, X_s) \varphi_s \varphi_s^*] ds \end{aligned}$$

9.3.2 Équations différentielles stochastiques

Soit $f, g : [0, T] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telles que

$$\sup_{0 \leq t \leq T} (|f(t, 0)| + |g(t, 0)|) < \infty$$

et en outre il existe K tel que

$$|f(t, x) - f(t, y)| + |g(t, x) - g(t, y)| \leq K|x - y|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, t \in [0, T] \quad (9.2)$$

La condition (9.2) est appelée condition de Lipschitz. On a le

Théorème 9.3.7. *Sous les conditions ci-dessus, en particulier (9.2), pour tout $x \in \mathbb{R}$, l'EDS*

$$X_t = x + \int_0^t f(s, X_s) ds + \int_0^t g(s, X_s) dB_s, \quad 0 \leq t \leq T,$$

admet une unique solution $X \in M^2(0, T)$.

PREUVE Notons F l'application de l'espace $M^2(0, T)$ dans lui-même définie par

$$F(X)_t = x + \int_0^t f(s, X_s) ds + \int_0^t g(s, X_s) dB_s, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Une solution de l'EDS est un point fixe de F . Or pour que F admette un unique point fixe, il suffit qu'elle soit une contraction stricte pour une norme bien choisie sur $M^2(0, T)$.

Appliquons la formule d'Itô au processus d'Itô $F(X)_t - F(Y)_t$ et à la fonction $\Phi(t, x) = e^{-\alpha t}|x|^2$ ($\alpha > 0$ qui sera choisi plus loin). On obtient

$$\begin{aligned} & e^{-\alpha T}|F(X)_T - F(Y)_T|^2 + \alpha \int_0^T e^{-\alpha t}|F(X)_t - F(Y)_t|^2 dt \\ &= 2 \int_0^T e^{-\alpha t}(F(X)_t - F(Y)_t)(f(t, X_t) - f(t, Y_t))dt \\ &+ 2 \int_0^T e^{-\alpha t}(F(X)_t - F(Y)_t)(g(t, X_t) - g(t, Y_t))dB_t \\ &+ \int_0^T e^{-\alpha t}|g(t, X_t) - g(t, Y_t)|^2 dt. \end{aligned}$$

Nous allons prendre l'espérance dans cette identité ; nous admettrons que l'intégrale stochastique est intégrable et d'espérance nulle. Il vient, en utilisant en outre la condition de Lipschitz :

$$\begin{aligned} & e^{-\alpha T}\mathbb{E}|F(X)_T - F(Y)_T|^2 + \alpha\mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t}|F(X)_t - F(Y)_t|^2 dt \\ &= \mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t} [2(F(X)_t - F(Y)_t)(f(t, X_t) - f(t, Y_t)) \\ &\quad + |g(t, X_t) - g(t, Y_t)|^2] dt \\ &\leq \mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t} [2K|F(X)_t - F(Y)_t| \times |X_t - Y_t| + K^2|X_t - Y_t|^2] dt. \end{aligned}$$

Il résulte de l'inégalité de Cauchy-Schwartz que

$$\begin{aligned} & 2K\mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t}|F(X)_t - F(Y)_t| \times |X_t - Y_t| dt \\ &\leq \mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t}|F(X)_t - F(Y)_t|^2 dt + K^2\mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t}|X_t - Y_t|^2 dt. \end{aligned}$$

Donc

$$(\alpha - 1)\mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t}|F(X)_t - F(Y)_t|^2 dt \leq 2K^2\mathbb{E} \int_0^T e^{-\alpha t}|X_t - Y_t|^2 dt$$

On choisit alors $\alpha = 2K^2 + 2$, d'où :

$$\mathbb{E} \int_0^T e^{-(2K^2+2)t} |F(X)_t - F(Y)_t|^2 dt \leq \frac{2K^2}{2K^2+1} \mathbb{E} \int_0^T e^{-(2K^2+2)t} |X_t - Y_t|^2 dt.$$

9.3.3 Formule de Feynman–Kac

On considère l'équation aux dérivées partielles parabolique rétrograde :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + f(x) \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{1}{2} g^2(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = c(x)u(t, x), \\ 0 \leq t \leq T, \quad x \in \mathbb{R}; \quad u(T, x) = h(x), \quad x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (9.3)$$

On suppose que f, g satisfont la condition (9.2), que c et φ sont continues et bornées sur \mathbb{R} . Pour chaque $0 < t < T$, $x \in \mathbb{R}$, on note $\{X_s^{t,x}, t \leq s \leq T\}$ la solution de l'EDS :

$$X_s^{t,x} = x + \int_t^s f(X_r^{t,x}) dr + \int_t^s g(X_r^{t,x}) dB_r, \quad t \leq s \leq T.$$

On a alors le

Théorème 9.3.8. *Supposons que $u \in C_b^{1,2}((0, T) \times \mathbb{R})$ est solution de l'EDP (9.3). Alors u est donné par la formule de Feynman–Kac :*

$$u(t, x) = \mathbb{E} \left[h(X_T^{t,x}) \exp \left(- \int_t^T c(X_s^{t,x}) ds \right) \right]$$

PREUVE On applique la formule d'Itô au processus $(X_s^{t,x}, Y_s)$, avec $Y_s = - \int_t^s c(X_r^{t,x}) dr$, et à la fonction $\Phi(s, x, y) = u(s, x) \exp(y)$. Il vient

$$\begin{aligned} u(T, X_T^{t,x}) \exp \left(- \int_t^T c(X_s^{t,x}) ds \right) &= u(t, x) \\ &+ \int_t^T \exp \left(- \int_t^s c(X_r^{t,x}) dr \right) g(X_s^{t,x}) \frac{\partial u}{\partial x}(s, X_s^{t,x}) dB_s \\ &+ \int_t^T \left(\frac{\partial u}{\partial s} + Lu - cu \right)(s, X_s^{t,x}) \exp(Y_s) ds, \end{aligned}$$

où $Lu(s, x) = f(x) \frac{\partial u}{\partial x}(s, x) + \frac{1}{2} g^2(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(s, x)$. Il reste à prendre l'espérance, et à exploiter le fait que u est solution de (9.3) pour conclure.

9.3.4 L'EDP de Black-Scholes

On va présenter une première façon de résoudre le problème du *pricing* et de la *couverture* d'une option européenne, en passant par la dérivation d'une EDP.

On s'intéresse à une option européenne, qui rapporte à son détenteur $H = h(S(T))$ à l'échéance T . Encore une fois nous pensons aux deux cas $h(x) = (x - K)_+$ et $h(x) = (K - x)_+$.

Le prix de cette option à l'instant t est E_t , $0 \leq t \leq T$. Bien sûr on a $E_T = h(S(T))$. On va supposer - on le démontrera ci-dessous à la section 9.3.9 - qu'il existe une application

$$u : [0, T] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$$

telle que pour tout $0 \leq t \leq T$,

$$E_t = u(t, S_t).$$

Nous allons en outre supposer - là encore on peut le démontrer, mais c'est un petit peu plus difficile - que

$$u \in C^{1,2}((0, T) \times \mathbb{R}_+),$$

si bien que l'on peut appliquer la formule d'Itô.

Notons que l'on a

$$E_t = u(t, S_0 \exp(\lambda t + \sigma B_t)),$$

donc une application de la formule d'Itô du théorème 9.3.4 nous donne

$$\begin{aligned} dE_t &= \left(\frac{\partial u}{\partial t}(t, S_t) + \mu S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t) + \frac{\sigma^2}{2} S_t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, S_t) \right) dt \\ &\quad + \sigma S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t) dB_t \end{aligned}$$

L'absence d'opportunité d'arbitrage nous impose que s'il existe une stratégie admissible $\{(X_t, Y_t), 0 \leq t \leq T\}$ telle que la richesse associée à l'instant final soit

$$V_T(X, Y) = h(S_T),$$

alors nécessairement

$$V_t(X, Y) = E_t, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Par ailleurs,

$$V_t(X, Y) = X_t R_t + Y_t S_t,$$

et la condition d'autofinancement s'écrit en temps continu

$$dV_t(X, Y) = X_t dR_t + Y_t dS_t.$$

Mais

$$dR_t = r R_t dt$$

et en utilisant une fois de plus la formule d'Itô, on obtient

$$dS_t = \mu S_t dt + \sigma S_t dB_t.$$

On déduit des dernières identités une seconde formule pour la différentielle de E_t , à savoir

$$dE_t = (r X_t R_t + \mu Y_t S_t) dt + \sigma Y_t S_t dB_t$$

On va maintenant utiliser un résultat bien connu des aficionados du calcul stochastique, à savoir que lorsque deux processus d'Itô sont identiques, on a nécessairement identité des coefficients de dB_t , et identité des coefficients de dt .

D'où d'une part :

$$\sigma Y_t S_t = \sigma S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t),$$

soit encore

$$Y_t = \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t)$$

(on vient d'identifier la stratégie de couverture, sur laquelle nous reviendrons ci-dessous), et en outre

$$\begin{aligned} r X_t R_t + \mu Y_t S_t &= \frac{\partial u}{\partial t}(t, S_t) + \mu S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t) \\ &\quad + \frac{\sigma^2}{2} S_t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, S_t) \end{aligned}$$

Mais on sait déjà que

$$Y_t = \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t),$$

d'où l'on tire, grâce à

$$\begin{aligned} X_t R_t + Y_t S_t &= u(t, S_t), \\ X_t &= R_t^{-1} \left(u(t, S_t) - S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t) \right). \end{aligned}$$

Donc la relation ci-dessus devient

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, S_t) + rS_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t) + \frac{\sigma^2}{2} S_t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, S_t) = ru(t, S_t) \\ u(T, S_T) = h(S_T) \end{cases}$$

Une C.N.S. pour que ces relations soient satisfaites p.s. est que u soit solution de l'EDP parabolique

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + rx \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{\sigma^2 x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = ru(t, x), \\ 0 < t < T, x \in \mathbb{R}_+; \quad u(T, x) = h(x), x \in \mathbb{R}_+. \end{cases} \quad (9.4)$$

9.3.5 La formule de Black–Scholes (2)

Rappelons que

$$S_t = S_0 + \mu \int_0^t S_s ds + \sigma \int_0^t S_s dB_s.$$

Posons

$$B_t^* := B_t + \frac{\mu - r}{\sigma} t.$$

Alors

$$S_t = S_0 + r \int_0^t S_s ds + \sigma \int_0^t S_s dB_s^*.$$

Soit maintenant \mathbb{P}^* une probabilité sur (Ω, \mathcal{F}) telle que sous \mathbb{P}^* , $\{B_t^*, t \geq 0\}$ soit un mouvement brownien. Non seulement une telle probabilité existe, mais on verra ci-dessous qu'elle est équivalente à la probabilité \mathbb{P} (sous laquelle c'est $\{B_t\}$ qui est un brownien).

Notons que

$$d(R_t^{-1} S_t) = \sigma R_t^{-1} S_t dB_t^*,$$

donc le prix actualisé $\tilde{S}_t = R_t^{-1} S_t$ est une martingale sous \mathbb{P}^* , qui a nouveau s'interprète comme la *probabilité risque neutre*.

Il résulte alors de la formule de Feynman–Kac (théorème 9.3.8) et de l'équation (9.4) que

$$u(t, x) = \mathbb{E}^* [e^{-r(T-t)} h(S_T) | S_t = x],$$

soit

$$E_t = u(t, S_t) = \mathbb{E}^* [e^{-r(T-t)} h(S_T) | S_t],$$

et en particulier

$$E_0 = u(0, S_0) = \mathbb{E}^* [e^{-rT} h(S_T)].$$

Sachant que sous \mathbb{P}^* , la loi de $\log(S_T/S_0)$ est la loi $N((r - \frac{\sigma^2}{2})T, \sigma^2 T)$, on en déduit en particulier les formules pour C_0 et P_0 que l'on avait obtenues une première fois à la section 9.2.6.

9.3.6 Généralisation du modèle de Black–Scholes

Dans le cas du call, on remarque que $h'(x) \geq 0$, et on s'attend à ce que $\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \geq 0$: toutes choses égales par ailleurs, si le cours du sous-jacent monte, le prix de l'option monte ; donc on s'attend à ce que $Y_t \geq 0$. Notons que ces inégalités sont renversées dans le cas du put !

Par contre rien n'indique si la somme d'argent X_t mise sur l'actif non risqué est positive ou négative (i.e. s'il s'agit d'un dépôt ou d'un prêt), et l'hypothèse que le taux d'intérêt est le même pour les deux cas est tout à fait irréaliste.

Supposons donc que les dépôts bénéficient d'un taux r^+ , alors que les prêts se font aux taux r^- . En posant

$$R_t^+ = e^{r^+ t}, \quad R_t^- = e^{r^- t},$$

on a, dans le cas d'une stratégie autofinancée, si $X_t^+ = \max(0, X_t)$, $X_t^- = \max(0, -X_t)$,

$$dV_t = (X_t^+ r^+ R_t^+ - X_t^- r^- R_t^-) dt + Y_t dS_t.$$

Si l'on reprend la démarche qui a conduit à la section 9.3.4 à l'EDP de Black–Scholes, on voit que l'on obtient à nouveau

$$Y_t = \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t),$$

et cette fois

$$\begin{aligned} X_t^+ R_t^+ &= (u(t, S_t) - S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t))_+ \\ X_t^- R_t^- &= (u(t, S_t) - S_t \frac{\partial u}{\partial x}(t, S_t))_-, \end{aligned}$$

d'où l'on tire l'EDP *non linéaire*.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{\sigma^2 x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = H(r^+, r^-, x, u(t, x), \frac{\partial u}{\partial x}(t, x)); \\ u(T, x) = h(x), \end{cases}$$

avec $H(a, b, x, y, p) = a(y - xp)_+ - b(y - rp)_-$.

9.3.7 La formule de Black-Scholes (3)

Nous allons nous poser une question un peu plus générale que la question précédente.

Étant donnée une option qui rapporte à son détenteur la somme $H(\geq 0)$ à l'instant T , quel est le juste prix de cette option? On suppose que la v.a. H est \mathcal{F}_T mesurable, où à nouveau, aux ensembles de mesure nulle près,

$$\mathcal{F}_t = \sigma\{B_s, 0 \leq s \leq t\} = \sigma\{S_s; 0 \leq s \leq t\}.$$

Un exemple particulier est le cas où

$$H = h(S_T),$$

notamment pour le call et le put européens, mais on verra plus loin d'autres types d'options, qui ne sont pas de cette forme particulière.

Nous allons nous laisser guider par ce que nous avons fait dans le cas du modèle discret, et dans les sections précédentes.

On pose la question sous la forme suivante : trouver V_0 et une stratégie autofinancée $\{(X_t, Y_t); 0 \leq t \leq T\}$, tels que

$$\begin{aligned} V_T(X, Y) &= V_0 + \int_0^T X_t dR_t + \int_0^T Y_t dS_t \\ &= H. \end{aligned}$$

A nouveau $R_t = e^{rt}$, et on définit la valeur actualisée du portefeuille à l'instant t :

$$\begin{aligned} \tilde{V}_t(X, Y) &= R_t^{-1} V_t(X, Y) \\ &= X_t + \tilde{Y}_t, \end{aligned}$$

en posant $\tilde{Y}_t \triangleq R_t^{-1}Y_tS_t$; c'est la valeur actualisée de la partie du portefeuille investie sur l'actif risqué. Alors

$$\tilde{Y}_t = \tilde{V}_t - X_t.$$

En outre

$$\begin{aligned} d\tilde{V}_t(X, Y) &= -r\tilde{V}_t dt + R_t^{-1}dV_t \\ &= -r\tilde{V}_t dt + rX_t dt + R_t^{-1}Y_t dS_t \\ &= -r\tilde{Y}_t dt + R_t^{-1}Y_t dS_t. \end{aligned}$$

Mais

$$dS_t = \mu S_t dt + \sigma S_t dB_t,$$

donc

$$d\tilde{V}_t = (\mu - r)\tilde{Y}_t dt + \sigma\tilde{Y}_t dB_t.$$

Posons finalement

$$B_t^* \triangleq \frac{\mu - r}{\sigma}t + B_t.$$

Alors

$$d\tilde{V}_t = \sigma\tilde{Y}_t dB_t^*,$$

soit

$$\tilde{V}_t = e^{-rT}H - \sigma \int_t^T \tilde{Y}_s dB_s^*$$

Soit maintenant \mathbb{P}^* la probabilité sur (Ω, \mathcal{F}_T) telle que

$$\{B_t^*; 0 \leq t \leq T\}$$

soit un \mathbb{P}^* mouvement brownien. On suppose que

$$\mathbb{E}^*(H^2) < \infty.$$

Sous cette hypothèse, on montre aisément que

$$\mathbb{E}^* \int_0^T |\tilde{Y}_t|^2 dt < \infty,$$

donc en particulier

$$\tilde{V}_t = e^{-rT} \mathbb{E}^*(H | \mathcal{F}_t),$$

soit

$$V_t = e^{-r(T-t)} \mathbb{E}^*(H | \mathcal{F}_t),$$

ce qui redonne encore une fois la formule de Black-Scholes pour les prix du call et du put européen.

Qu'en est-il de la stratégie de couverture? Sous \mathbb{P}^* , $\{\tilde{V}_t\}$ est une martingale de carré intégrable adaptée à la filtration $\mathcal{F}_t^{B^*}$. Un théorème général d'Itô nous dit alors que

$$\tilde{V}_t = V_0 + \int_0^t Z_s dB_s^*, \quad 0 \leq t \leq T,$$

avec un unique $Z \in M^2(0, T)$. On retrouve

$$Y_t = \frac{R_t Z_t}{\sigma S_t}.$$

Dans le cas où $H = h(S_T)$, on a l'EDP de Black-Scholes et Y_t se calcule en fonction de la dérivée de sa solution. Dans des cas plus généraux, le calcul peut se faire (mais de façon pas très explicite!) avec d'autres outils de calcul stochastique, par exemple le calcul de Malliavin.

Terminons cette section par deux exemples classiques d'options qui ne sont pas de la forme $H = h(S_T)$.

Exemple 3.1 Option barrière d'achat

C'est une option qui rapporte à l'échéance :

$$H = \mathbf{1}_{\{\sup_{0 \leq t \leq T} S_t < \beta\}} (S_T - K)_+,$$

autrement dit on a le même gain qu'avec une option d'achat européenne, mais on n'a le droit d'exercer cette option que si le cours du sous-jacent n'a jamais atteint la barrière β .

Exemple 3.2 Option d'achat asiatique

Il s'agit d'une option qui rapporte à son détenteur à l'échéance

$$H = \left(\frac{1}{T} \int_0^T S_t dt - K \right)_+$$

9.3.8 Le théorème de Girsanov

La probabilité \mathbb{P}^* peut paraître mystérieuse. En fait elle apparaît naturellement dans le théorème de Girsanov, dont nous allons en fait donner une version simplifiée due à Cameron et Martin.

Etablissons tout d'abord le

Lemme 9.3.9. *Un processus continu $\{B_t, 0 \leq t \leq T\}$ est un mouvement brownien ssi pour tout n , tous $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n \leq T$, $u_1, \dots, u_n \in \mathbb{R}$,*

$$\mathbb{E} \exp \left[\sum_1^n u_k (B_{t_k} - B_{t_{k-1}}) \right] = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_1^n u_k^2 (t_k - t_{k-1}) \right]$$

PREUVE La CN résulte de ce que si $\{B_t\}$ est un mouvement brownien, la loi du v.a. $(B_{t_1}, B_{t_2} - B_{t_1}, \dots, B_{t_n} - B_{t_{n-1}})$ est la loi $N(0, \Lambda_n)$, avec Λ_n matrice diagonale $n \times n$, dont le k -ième terme diagonal vaut $t_k - t_{k-1}$.

La CS résulte de ce que si la formule est vraie, la loi de $(B_{t_1}, B_{t_2} - B_{t_1}, \dots, B_{t_n} - B_{t_{n-1}})$ est la loi $N(0, \Lambda_n)$, pour tous n , $0 < t_1 < \dots < t_{n-1} \leq t_n$, donc (i) et (ii) de la Définition 9.3.1 sont satisfaits. \square

On a alors le

Théorème 9.3.10. *Soit $\{B_t, 0 \leq t \leq T\}$ un mouvement brownien défini sur l'espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.*

Si $f \in L^2(0, T)$,

$$B_t^* = B_t - \int_0^t f(s) ds, \quad 0 \leq t \leq T;$$

$$Z_t = \exp \left(\int_0^t f(s) dB_s - \frac{1}{2} \int_0^t f^2(s) ds \right)$$

et \mathbb{P}^ est la probabilité sur (Ω, \mathcal{F}_T) telle que*

$$\frac{d\mathbb{P}^*}{d\mathbb{P}} = Z_T,$$

alors $\{B_t^, 0 \leq t \leq T\}$ est un mouvement brownien sous \mathbb{P}^* .*

PREUVE Au vu du lemme précédent, il suffit de montrer que pour tout $g \in L^2(0, T)$,

$$\mathbb{E}^* \left[\exp \left(\int_0^T g(t) dB_t^* \right) \right] = \exp \left(\frac{1}{2} \int_0^T g^2(t) dt \right)$$

Mais

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}^* \left[\exp \left(\int_0^T g(t) dB_t^* \right) \right] \\ &= \mathbb{E}^* \exp \left\{ \int_0^T [f(t) + g(t)] dB_t - \frac{1}{2} \int_0^T [2f(t)g(t) + f^2(t)] dt \right\} \\ &= \exp \left(\frac{1}{2} \int_0^T g^2(t) dt \right) \end{aligned}$$

9.3.9 Propriété de Markov et EDP

Pour obtenir l'“EDP de Black-Scholes” à la section 9.3.4, nous avons admis qu'à chaque instant t , le prix E_t de l'option est une fonction du cours du sous-jacent S_t , i.e. que E_t s'écrit

$$E_t = u(t, S_t)$$

On a vu à la section 9.3.7 que

$$E_t = \frac{R_t}{R_T} \mathbb{E}^*(H | \mathcal{F}_t).$$

Pourquoi et à quelle condition cette espérance conditionnelle est-elle une fonction de S_t ?

Définition 9.3.11. Soit $\{X_t, t \geq 0\}$ un processus stochastique. $\{X_t\}$ est appelé processus de Markov si pour tout $0 < s < t$, toute $f \in C_b(\mathbb{R})$,

$$\mathbb{E}[f(X_t) | \mathcal{F}_s^X] = \mathbb{E}[f(X_t) | X_s],$$

où $\mathcal{F}_s^X \triangleq \sigma\{X_r; 0 \leq r \leq s\}$ (à des ensembles de mesure nulle près).

Remarquons que (à des ensembles de mesure nulle près) $\mathcal{F}_t = \sigma\{S_s; 0 \leq s \leq t\}$. On a la

Proposition 9.3.12. Sous \mathbb{P}^* , $\{S_t; 0 \leq t \leq T\}$ est un processus de Markov.

PREUVE Si $0 < s < t$,

$$S_t = S_s \exp \left[\left(r - \frac{\sigma^2}{2} \right) (t - s) + \sigma (B_t^* - B_s^*) \right]$$

Donc

$$\begin{aligned}\mathbb{E}^*[f(S_t)|\mathcal{F}_s] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f\left(S_s \exp\left[\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)(t-s) + \sigma x \sqrt{t-s}\right]\right) e^{-x^2/2} dx \\ &= \mathbb{E}^*[f(S_t)|S_s],\end{aligned}$$

puisque S_s et \mathcal{F}_s mesurable, et $B_t^* - B_s^*$ est indépendante de \mathcal{F}_s sous \mathbb{P}^* . \square

On peut donc en fait utiliser la formule de Feynman–Kac à l’envers, i.e. déduire l’EDP satisfaite par la fonction $u(t, x)$ de la formule

$$E_t = \mathbb{E}^*[e^{-r(T-t)} h(S_T) | S_t].$$

Nous pouvons maintenant nous demander si dans les cas de l’option barrière et de l’option asiatique, le calcul du prix de l’option peut encore se ramener à la résolution d’une EDP.

EDP associée à l’option barrière

Reprenons l’option barrière d’achat de l’exemple 3.1. Posons

$$S_t^\beta = S_{t \wedge \tau_\beta},$$

où $\tau_\beta = \inf\{t \leq T; S_t \geq \beta\}$, et

$$h(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \leq K; \\ x - K, & \text{si } K \leq x < \beta; \\ 0, & \text{si } x \geq \beta. \end{cases}$$

Alors, dans le cas de l’option barrière d’achat, la v.a. H se réécrit

$$H = h(S_t^\beta).$$

Par un argument analogue à celui de la proposition 9.3.12, on montre que $\{S_t^\beta, 0 \leq t \leq T\}$ est un processus de Markov. Sous la *probabilité risque neutre*, on a à la fois que $R_t^{-1} S_t$ et $R_{t \wedge \tau_\beta}^{-1} S_{t \wedge \tau_\beta}$ sont des martingales, et les arguments de la section 9.3.7 conduisent à nouveau à la formule

$$E_t = \mathbb{E}^*\left[\frac{R_t}{R_T} h(S_T^\beta) | S_t^\beta\right]$$

Notons que pour $t \geq \tau_\beta$, $E_t = 0$. Soit, si $E_t = u(t, S_t^\beta)$, $u(t, \beta) = 0$. L'EDP devient

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + rx \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{\sigma^2 x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = ru(t, x), & 0 < t < T, 0 < x < \beta; \\ u(t, \beta) = 0; & 0 < t < T; \quad u(T, x) = h(x), & 0 < x < \beta. \end{cases}$$

EDP associée à l'option asiatique

Posons $U_t = \int_0^t S_s ds$. Alors, dans le cas de l'option asiatique,

$$H = h(U_T),$$

avec cette fois $h(x) = (T^{-1}x - K)_+$. Il n'est pas trop difficile de vérifier que $\{U_t, 0 \leq t \leq T\}$ n'est pas un processus de Markov; par contre $\{(S_t, U_t); 0 \leq t \leq T\}$ est un processus de Markov, d'où

$$\begin{aligned} E_t &= \mathbb{E}^* \left(\frac{R_t}{R_T} H | \mathcal{F}_t \right) \\ &= \mathbb{E}^* \left(\frac{R_t}{R_T} H | S_t, U_t \right) \\ &= u(t, S_t, U_t), \end{aligned}$$

où $\{u(t, x, y); 0 \leq t \leq T, x > 0, y > 0\}$ est solution de l'EDP

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x, y) + \left(\frac{\sigma^2 x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + rx \frac{\partial u}{\partial x} + x \frac{\partial u}{\partial y} - ru \right) (t, x, y) = 0, \\ 0 \leq t \leq T, x, y > 0; \quad u(T, x, y) = h(y), \\ x > 0, y > 0. \end{cases}$$

9.3.10 Option portant sur plusieurs sous-jacent

Jusqu'ici nous nous sommes contentés d'étudier des options portant sur un seul actif risqué. Même si c'est le cas d'un grand nombre d'options, il en existe qui portent sur plusieurs actifs risqués à la fois. Un premier exemple typique de ce second type est le cas des options *spread*, qui portent sur l'écart entre les prix de deux actifs, i.e. $H = (S_T^1 - S_T^2)_+$, où S^1 et S^2 sont les prix de deux actifs risqués. Un second exemple est constitué par les *options*

sur portefeuille appelées aussi *options panier* (*basket option* en Anglais). Les *options sur indice* (type CAC 40) en sont un exemple. Une option de vente (*put*) sur portefeuille est un moyen d'assurer son portefeuille. Étant donné un portefeuille composé de a_i actions de prix S_t^i à l'instant t , $i = 1, \dots, d$, un put qui paye $(K - \sum_{i=1}^n a_i S_T^i)_+$ garantit que le portefeuille pourra être revendu au moins au prix K à l'échéance.

Supposons que, outre l'actif non risqué, qui cote $R_t = e^{rt}$ à l'instant t le marché est composé de d actifs risqués, dont les prix S_t^i , $i = 1, \dots, d$, fluctuent suivant le modèle

$$dS_t^i = \mu_i S_t^i dt + S_t^i \sum_{j=1}^d \sigma_{ij} dB_t^j, \quad 1 \leq i \leq d, \quad t \geq 0,$$

où B_t^1, \dots, B_t^d sont d mouvements brownien mutuellement indépendants. Une application de la formule d'Itô permet de vérifier que cette EDS multidimensionnelle admet comme unique solution

$$S_t^i = S_0^i \exp \left[\lambda_i t + \sum_{j=1}^d \sigma_{ij} B_t^j \right], \quad 1 \leq i \leq d, \quad t \geq 0,$$

avec $\lambda_i = \mu_i - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d \sigma_{ij}^2$.

La question naturelle à se poser, pour généraliser la théorie de Black-Scholes, est celle de l'existence d'une *probabilité risque neutre* \mathbb{P}^* équivalente à la probabilité \mathbb{P} , sous laquelle le processus des prix actualisés $e^{-rt} S_t = e^{-rt} (S_t^1, \dots, S_t^d)$, $t \geq 0$ soit une martingale vectorielle, ce qui sera une conséquence de l'existence d'un *\mathbb{P}^* -mouvement brownien d -dimensionnel* $\{B_t^*, t \geq 0\}$ tel que

$$dS_t^i = r S_t^i dt + S_t^i \sum_{j=1}^d \sigma_{ij} dB_t^{*,j}, \quad 1 \leq i \leq d, \quad t \geq 0.$$

Notons \mathbf{r} le vecteur de \mathbb{R}^d dont toutes les coordonnées sont égales à r , et

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \mu_d \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \cdot & \cdot & \sigma_{1d} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sigma_{d1} & \cdot & \cdot & \sigma_{dd} \end{pmatrix}.$$

La seconde écriture des S_t^i est équivalente à

$$(\mathbf{r} - \mu)t = \Sigma(B_t - B_t^*), \quad t \geq 0.$$

On est donc conduit à formuler l'hypothèse cruciale suivante :

$$\Sigma \text{ est inversible.} \quad (9.5)$$

Sous cette hypothèse, on déduit de la relation précédente entre B_t et B^* la formule

$$B_t^* = \Sigma^{-1}(\mathbf{r} - \mu)t + B_t, \quad t \geq 0. \quad (9.6)$$

Il résulte d'une généralisation naturelle (exercice) du théorème de Girsanov 9.3.10 que si

$$\frac{d\mathbb{P}^*}{d\mathbb{P}} = \exp \left[\langle \Sigma^{-1}(\mu - \mathbf{r}), B_T \rangle - \frac{1}{2} \|\Sigma^{-1}(\mu - \mathbf{r})\|^2 T \right],$$

alors $\{B_t^*, 0 \leq t \leq T\}$ et un mouvement brownien d -dimensionnel (i.e. $\{B_t^1\}, \dots, \{B_t^d\}$ sont des mouvements brownien scalaires mutuellement indépendants) sous \mathbb{P}^* .

En reprenant les arguments de la section 9.3.7, on a que le prix E_t de l'option à l'instant t est donné par la formule (formellement la même que dans le cas unidimensionnel)

$$E_t = e^{-r(T-t)} \mathbb{E}^*(H | \mathcal{F}_t),$$

d'où en particulier

$$E_0 = e^{-rT} \mathbb{E}^* H. \quad (9.7)$$

Si $H = h(S_T)$, on a donc $E_0 = e^{-rT} \mathbb{E}^* h(S_T)$. Notons pour $t \geq 0$ $\log S_t$ le vecteur $(\log S_t^1, \dots, \log S_t^d)$. Sous \mathbb{P}^* , la loi de $\log(S_T)$ est la loi de Gauss vectorielle $N(\log(S_0) + (\mathbf{r} - \frac{1}{2}s^2)T, \Sigma\Sigma^*T)$, où $s^2 = (s_1^2, \dots, s_d^2)$, avec $s_i^2 = \sum_{j=1}^d \sigma_{ij}^2$.

Le processus $\{S_t, t \geq 0\}$ à valeurs dans \mathbb{R}^d est un processus de Markov, donc dans le cas où $H = h(S_T)$, il existe une fonction $u : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$ telle que

$$E_t = u(t, S_t), \quad 0 \leq t \leq T.$$

On montre par un raisonnement analogue à celui de la section 9.3.4 que u est solution de l'EDP parabolique dans \mathbb{R}_+^d , avec $a = \Sigma\Sigma^*$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + r \sum_{i=1}^d x_i \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d x_i x_j a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(t, x) = ru(t, x), \\ 0 \leq t \leq T, \quad x \in \mathbb{R}_+^d; \quad u(T, x) = h(x), \quad x \in \mathbb{R}_+^d. \end{array} \right.$$

En outre, le portefeuille de couverture est déterminé par la relation

$$Y_t^i = \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, S_t), \quad 1 \leq i \leq d, \quad 0 \leq t \leq T,$$

au sens où Y_t^i est le “nombre” d’actifs numéro i que doit contenir ce portefeuille. La richesse associée est donc

$$V_t(X, Y) = X_t R_t + \sum_{i=1}^d Y_t^i S_t^i, \quad 0 \leq t \leq T.$$

9.3.11 Viabilité et Complétude

Les notions de marché *viable* et *complet* se définissent comme dans le cas du modèle discret, au petit point près qu’un marché complet est maintenant un marché tel que à toute v.a. $H \geq 0$ \mathcal{F}_T mesurable et de carré intégrable, on peut associer une richesse initiale V_0 et une stratégie admissible (X, Y) telles que

$$H = V_0 + \int_0^T X_t dR_t + \sum_{i=1}^d Y_t^i dS_t^i.$$

La restriction H de carré intégrable est inutile dans le cas du modèle discret, puisque dans ce modèle Ω est fini, donc toute v.a. est bornée.

On a le résultat fondamental

Théorème 9.3.13. *Le marché est viable ssi il existe au moins une probabilité risque neutre \mathbb{P}^* équivalente à \mathbb{P} . Le marché est complet s’il existe exactement une probabilité risque neutre \mathbb{P}^* équivalente à \mathbb{P} .*

Le fait que l’existence d’une probabilité risque neutre entraîne le caractère viable du marché se démontre comme dans le cas du modèle discret. Nous admettrons les autres affirmations de ce théorème.

9.3.12 Remarques sur le calcul effectif

Nous avons associé à toutes les options rencontrées jusqu’ici une EDP (au prix cependant d’un doublement de la dimension de la variable spatiale pour l’option asiatique, ce qui alourdit singulièrement la résolution numérique). Peut-on donner une formule probabiliste pour le prix de l’option dans le cas

du modèle considéré à la section 9.3.6 ? La réponse est oui, en faisant appel à la théorie des “EDS rétrogrades” ; mais la formule en question n’est pas du tout explicite.

Discutons maintenant du calcul effectif de la prime.

Formules explicites

Une première approche, qui n’est utilisable que dans les cas les plus simples (qui incluent cependant presque tous les cas examinés jusqu’ici) consiste à utiliser la connaissance de la loi des v.a. considérées, c’est à dire que dans le cas du call européen on utilise la formule

$$C_0 = S_0 F(d_1) - Ke^{-rT} F(d_2)$$

(cf. fin de la section 9.2.6), avec F fonction de répartition de la loi $N(0, 1)$, laquelle est accessible avec une bonne précision dans Matlab, ou dont le calcul numérique peut être programmé. En ce qui concerne l’option barrière, on peut utiliser la connaissance de la loi jointe du vecteur aléatoire $(\sup_{0 \leq t \leq T} S_t, S_T)$, et en ce qui concerne l’option asiatique des mathématiciens ont récemment progressé pour expliciter la loi de la variable aléatoire U_T .

Méthode de Monte Carlo

Une seconde méthode, dont le domaine d’application est beaucoup plus vaste, est la méthode de Monte Carlo, qui a été présentée au chapitre 1. Rappelons que pour réduire la variance (et donc accélérer la convergence) on a intérêt, dans la mesure où l’on dispose d’une formule de parité call-put, à calculer le prix du put par Monte Carlo, plutôt que directement celui du call.

Notons qu’une variante de la méthode de Monte Carlo consiste à simuler un arbre binomial (éventuellement avec un N - cf. section 9.2.6 - grand)

Résolution numérique de l’EDP

Une dernière méthode consiste à résoudre l’EDP par une méthode numérique de type différences finies. Notons que cela suppose de discrétiser le temps et l’espace (et de borner l’espace infini \mathbb{R}_+). Ces méthodes numériques ont été développées par les spécialistes du calcul scientifique pour beaucoup d’autres applications. Leur principale limitation est la dimension de la variable spatiale, lorsque l’on considère un modèle avec un grand nombre d’actifs risqués.

9.3.13 Volatilité historique - Volatilité implicite

L'utilisation des modèles ci-dessus pour le calcul de la prime suppose la connaissance de très peu de paramètres (il est remarquable que le paramètre μ dans le modèle initial des fluctuations de S_t a disparu). Le taux d'intérêt r peut être considéré comme connu.

Par contre la paramètre σ - la volatilité - n'est pas donné directement. On peut tenter de l'estimer à partir des données des fluctuations passées, c'est la *volatilité historique*.

Mais comme il existe un marché des options, où les prix sont régis par la loi de l'offre et de la demande, on peut inverser la formule de Black-Scholes, pour en déduire une valeur de σ , appelée *volatilité implicite*. Il est à noter que l'inversion de la formule pour différentes options de même échéance T , mais correspondant à des prix d'exercice différents, donne des volatilités implicites différentes - effet *smile*. Ce fait contredit le modèle de Black-Scholes, qui est trop simpliste pour traduire la complexité des marchés. Pourtant, sa simplicité conduit à des formules explicites et intuitives qui sont très utilisées par les praticiens.

9.4 Options américaines dans le modèle discret

Contrairement aux options dites "européennes", une option dite "américaine" peut être exercée à tout instant entre la date de signature du contrat (l'instant 0) et l'échéance (l'instant T). Notons $h(S_t)$ ce que rapporte l'option, lorsqu'elle est exercée à l'instant t . Dans le cas d'un call américain, $h(x) = (x - K)_+$, dans le cas d'un put américain, $h(x) = (K - x)_+$. On notera $Z_t = h(S_t)$, $0 \leq t \leq T$, et A_t le prix de l'option américaine à l'instant t , $0 \leq t \leq T$. En particulier, A_0 est la *prime* dont l'acheteur de l'option américaine doit s'acquitter au moment de la signature du contrat (l'instant 0).

On suppose à nouveau que

$$R_t = (1 + r)^t, \quad 0 \leq t \leq T,$$

et on définit les valeurs actualisées

$$\tilde{Z}_t = \frac{Z_t}{(1 + r)^t}, \quad \tilde{A}_t = \frac{A_t}{(1 + r)^t}.$$

Cherchons à préciser la valeur de A_t par récurrence rétrograde. Tout d'abord, il est clair que

$$A_T = Z_T.$$

A l'instant $T-1$, le détenteur de l'option a le choix entre l'exercer immédiatement, ou bien la conserver pour espérer en tirer un meilleur profit à l'instant T . Donc on a

$$A_{T-1} = Z_{T-1} \vee \frac{1}{1+r} \mathbb{E}^*(Z_T | S_{T-1}).$$

Par le même raisonnement, on a pour tout $0 < t \leq T$,

$$A_{t-1} = Z_{t-1} \vee \frac{1}{1+r} \mathbb{E}^*(A_t | S_{t-1}).$$

En terme des valeurs actualisées, on obtient

$$\begin{cases} \tilde{A}_T = \tilde{Z}_T \\ \tilde{A}_{t-1} = \tilde{Z}_{t-1} \vee \mathbb{E}^*(\tilde{A}_t | S_{t-1}), \quad 0 < t \leq T. \end{cases} \quad (9.8)$$

On pose la

Définition 9.4.1. *On appelle sur-martingale (resp. sous-martingale) une suite adaptée*

$\{M_t; 0 \leq t \leq T\}$ *telle que pour* $0 < t \leq T$,

$$\mathbb{E}[M_t | \mathcal{F}_{t-1}] \leq (\text{resp. } \geq) M_{t-1}.$$

On a la

Proposition 9.4.2. *La suite* $\{\tilde{A}_t, 0 \leq t \leq T\}$ *est une* \mathbb{P}^* -*surmartingale. C'est la plus petite* \mathbb{P}^* -*surmartingale qui majore la suite* $\{\tilde{Z}_t, 0 \leq t \leq T\}$.

PREUVE La propriété de surmartingale, et le fait que la suite $\{\tilde{A}_t\}$ majore la suite $\{\tilde{Z}_t\}$ découlent immédiatement de la relation (9.8). Soit maintenant $\{M_t\}$ une autre \mathbb{P}^* -surmartingale qui majore $\{\tilde{Z}_t\}$. Alors $M_T \geq \tilde{Z}_T = \tilde{A}_T$, et si $M_t \geq \tilde{A}_t$,

$$M_{t-1} \geq \mathbb{E}^*(M_t | \mathcal{F}_{t-1}) \geq \mathbb{E}^*(\tilde{A}_t | \mathcal{F}_{t-1}),$$

et aussi $M_{t-1} \geq \tilde{Z}_{t-1}$, donc

$$M_{t-1} \geq \tilde{Z}_{t-1} \vee \mathbb{E}^*(\tilde{A}_t | \mathcal{F}_{t-1}) = \tilde{A}_{t-1}.$$

□

Pour poursuivre notre étude des options américaines, nous allons préciser ce qu'est la plus petite surmartingale majorant une suite adaptée donnée.

9.4.1 Enveloppe de Snell

Commençons par la :

Définition 9.4.3. Une v.a. ν à valeurs dans l'ensemble $\{0, 1, \dots, T\}$ est appelée un temps d'arrêt si pour tout $0 \leq t \leq T$,

$$\{\nu = t\} \in \mathcal{F}_t.$$

Etant donnée une suite aléatoire adaptée $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$ et un temps d'arrêt, la suite arrêtée $\{X_{t \wedge \nu}, 0 \leq t \leq T\}$ est encore adaptée. Ceci résulte de ce que ν est un temps d'arrêt ssi $\{\nu \leq t\} \in \mathcal{F}_t$ pour tout $0 \leq t \leq T$. On a en outre le théorème d'arrêt

Théorème 9.4.4. Si $\{M_t, 0 \leq t \leq T\}$ est une martingale (resp. une surmartingale), alors $\{M_{t \wedge \nu}, 0 \leq t \leq T\}$ est aussi une martingale (resp. une surmartingale).

PREUVE Il suffit de remarquer (avec la notation de la proposition 9.2.6) que

$$M_{t \wedge \nu} = M(Y)_t, \quad 0 \leq t \leq T,$$

si $Y_t = \mathbf{1}_{\{t \leq \nu\}}$. Puisque $\{t \leq \nu\} = \{\nu \leq t-1\}^c$, la suite Y est prévisible, et le résultat pour les martingales est la proposition 9.2.6. Le même raisonnement, en exploitant la positivité de Y donne le résultat pour les surmartingales. \square

Etant donnée une suite adaptée $\{Z_t, 0 \leq t \leq T\}$, on veut étudier son *enveloppe de Snell*, autrement dit la plus petite surmartingale qui la majore. Celle-ci est la suite $\{U_t, 0 \leq t \leq T\}$ définie par

$$\begin{cases} U_T = Z_T, \\ U_t = Z_t \vee \mathbb{E}(U_{t+1} | \mathcal{F}_t), \quad 0 \leq t < T. \end{cases}$$

Notons que tant que $U_t > Z_t$, $U_t = \mathbb{E}(U_{t+1} | \mathcal{F}_t)$. Cette remarque se formalise en la

Proposition 9.4.5. La v.a. définie par

$$\nu = \inf\{0 \leq t \leq T | U_t = Z_t\}$$

est un temps d'arrêt, et la suite arrêtée $\{U_{t \wedge \nu}, 0 \leq t \leq T\}$ est une martingale.

PREUVE Notons tout d'abord que

$$\{\nu = t\} = \{U_0 > Z_0\} \cap \cdots \cap \{U_{t-1} > Z_{t-1}\} \cap \{U_t = Z_t\} \in \mathcal{F}_t.$$

On pose à nouveau $Y_t = \mathbf{1}_{\{t \leq \nu\}}$, $U_{t \wedge \nu} = U(Y)_t$.

$$U(Y)_{t+1} - U(Y)_t = \mathbf{1}_{\{t+1 \leq \nu\}}(U_{t+1} - U_t),$$

et sur $\{t+1 \leq \nu\}$, $U_t = \mathbb{E}(U_{t+1} | \mathcal{F}_t)$, donc $\mathbb{E}(U(Y)_{t+1} - U(Y)_t | \mathcal{F}_t) = 0$. \square

Notons \mathcal{T}_t l'ensemble des temps d'arrêt qui prennent leurs valeurs dans l'ensemble $\{t, t+1, \dots, T\}$.

Corollaire 9.4.6. *On a*

$$U_0 = \mathbb{E}(Z_\nu | \mathcal{F}_0) = \sup_{\tau \in \mathcal{T}_0} \mathbb{E}(Z_\tau | \mathcal{F}_0).$$

PREUVE D'après la proposition 9.4.5, $\{U_{\cdot \wedge \nu}\}$ est une martingale, donc

$$\begin{aligned} U_0 &= \mathbb{E}(U_{T \wedge \nu} | \mathcal{F}_0) \\ &= \mathbb{E}(Z_\nu | \mathcal{F}_0). \end{aligned}$$

Si $\tau \in \mathcal{T}_0$, d'après le théorème 9.4.4, $\{U_{\cdot \wedge \tau}\}$ est une surmartingale, donc

$$\begin{aligned} U_0 &\geq \mathbb{E}(U_{N \wedge \tau} | \mathcal{F}_0) \\ &\geq \mathbb{E}(Z_\tau | \mathcal{F}_0). \end{aligned}$$

\square

Le corollaire se généralise en

$$\begin{aligned} U_t &= \sup_{\tau \in \mathcal{T}_t} \mathbb{E}(Z_\tau | \mathcal{F}_t) \\ &= \mathbb{E}(Z_{\nu_t} | \mathcal{F}_t), \end{aligned}$$

si $\nu_t = \inf\{s \geq t | U_s = Z_s\}$. On appelle *temps d'arrêt optimal* un temps d'arrêt qui vérifie la propriété d'optimalité du temps d'arrêt ν établie au corollaire 9.4.6. Le théorème qui suit dit que ce ν est le plus petit des temps d'arrêt optimaux.

Théorème 9.4.7. *Le temps d'arrêt ν est optimal ssi les deux conditions suivantes sont vérifiées*

- (i) $Z_\nu = U_\nu$
- (ii) $\{U_{t \wedge \nu}, 0 \leq t \leq T\}$ est une martingale.

PREUVE (i)+(ii) implique $U_0 = \mathbb{E}(Z_\nu | \mathcal{F}_0)$, donc l'optimalité de ν d'après le corollaire 9.4.6.

Réciproquement, supposons ν optimal. Alors

$$U_0 = \mathbb{E}(Z_\nu | \mathcal{F}_0) \leq \mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_0),$$

et puisque $\{U_{\cdot \wedge \nu}\}$ est un surmartingale, $\mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_0) \leq U_0$, donc $\mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_0) = \mathbb{E}(Z_\nu | \mathcal{F}_0) = U_0$, d'où comme U domine Z , $U_\nu = Z_\nu$, soit (i). Encore une fois $\{U_{\cdot \wedge \nu}\}$ est une surmartingale, donc

$$U_0 \geq \mathbb{E}(U_{t \wedge \nu} | \mathcal{F}_0) \geq \mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_0),$$

mais comme les deux termes extrêmes coïncident, on a

$$\mathbb{E}(U_{t \wedge \nu} | \mathcal{F}_0) = \mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_0) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_t) | \mathcal{F}_0).$$

Comme d'un autre coté $U_{t \wedge \nu} \geq \mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_t)$, on a l'égalité $U_{t \wedge \nu} = \mathbb{E}(U_\nu | \mathcal{F}_t)$, soit (ii).

9.4.2 Décomposition de Doob

On a la

Proposition 9.4.8. *Toute surmartingale $\{U_t, 0 \leq t \leq T\}$ s'écrit de façon unique sous la forme*

$$U_t = M_t - C_t,$$

où $\{M_t, 0 \leq t \leq T\}$ est une martingale, et $\{C_t, 0 \leq t \leq T\}$ est une suite croissante, prévisible t.q. $C_0 = 0$.

PREUVE Nécessairement, $M_0 = U_0$ et $C_0 = 0$. En outre

$$U_{t+1} - U_t = M_{t+1} - M_t - C_{t+1} + C_t,$$

d'où en conditionnant par \mathcal{F}_t ,

$$\mathbb{E}(U_{t+1} | \mathcal{F}_t) - U_t = -C_{t+1} + C_t,$$

et

$$M_{t+1} - M_t = U_{t+1} - \mathbb{E}(U_{t+1}|\mathcal{F}_t).$$

□

En outre

Proposition 9.4.9. *Soit $\{Z_t, 0 \leq t \leq T\}$ une suite adaptée, d'enveloppe de Snell $U_t = M_t - C_t$. Alors le plus grand temps d'arrêt optimal est donné par*

$$\nu_{\max} = \inf\{t \leq T, C_{t+1} \neq 0\}.$$

PREUVE Le fait que ν_{\max} est un temps d'arrêt résulte de ce que $\{C.\}$ est prévisible. De $C_t = 0$ pour $t \leq \nu_{\max}$, on déduit que

$$U_{\cdot \wedge \nu_{\max}} = M_{\cdot \wedge \nu_{\max}},$$

donc $\{U_{\cdot \wedge \nu_{\max}}\}$ est une martingale. D'après le théorème 9.4.7, il suffit pour montrer que ν_{\max} est optimal, de montrer l'égalité $U_{\nu_{\max}} = Z_{\nu_{\max}}$. Posons $Y_t = \mathbf{1}_{\{\nu_{\max}=t\}}$.

$$\begin{aligned} U_{\nu_{\max}} &= \sum_{t=0}^{T-1} Y_t U_t + Y_T U_T \\ &= \sum_{t=0}^{T-1} Y_t \max(Z_t, \mathbb{E}(U_{t+1}|\mathcal{F}_t)) + Y_T Z_T \\ &= \sum_{t=0}^{T-1} Y_t Z_t + Y_T Z_T \\ &= Z_{\nu_{\max}}, \end{aligned}$$

où on a utilisé les faits suivants : $\mathbb{E}(U_{t+1}|\mathcal{F}_t) = M_t - C_{t+1}$, et sur $\{Y_t = 1\}$, $C_t = 0$ et $C_{t+1} > 0$, soit $\mathbb{E}(U_{t+1}|\mathcal{F}_t) = M_t - C_{t+1} < U_t$, d'où nécessairement $U_t = Z_t$.

Il reste à montrer qu'il n'existe pas de temps d'arrêt optimal ν tel que $\nu \geq \nu_{\max}$ et $\mathbb{P}(\nu > \nu_{\max}) > 0$. En effet on aurait

$$\mathbb{E}(U_\nu) = \mathbb{E}(M_\nu) - \mathbb{E}(C_\nu) = \mathbb{E}(U_0) - \mathbb{E}(C_\nu) < \mathbb{E}(U_0),$$

donc $\{U_{\cdot \wedge \nu}\}$ n'est pas une martingale.

9.4.3 Enveloppe de Snell et chaînes de Markov

Précisons maintenant la forme de l'enveloppe de Snell dans une situation markovienne. Soit $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$ une chaîne de Markov homogène à valeurs dans un ensemble fini E , de matrice de transition $P = \{P_{xy}, x, y \in E\}$. On suppose alors que pour $0 \leq t \leq T$, $\mathcal{F}_t = \sigma\{X_0, \dots, X_t\}$.

Proposition 9.4.10. *Soit $\{Z_t\}$ une suite définie par $Z_t = \psi(t, X_t)$, avec $\psi : \{0, 1, \dots, T\} \times E \rightarrow \mathbb{R}$. Alors l'enveloppe de Snell $\{U_t\}$ de la suite $\{Z_t\}$ est donnée par la formule $U_t = u(t, X_t)$, où la fonction u est définie par*

$$\begin{cases} u(T, x) = \psi(T, x), & x \in E; \\ u(t, x) = \psi(t, x) \vee \sum_y P_{xy} u(t+1, y), & x \in E, 0 \leq t < T. \end{cases}$$

En pratique, pour déterminer le temps d'arrêt

$$\nu = \inf\{t, U_t = Z_t\},$$

on calcule la solution u du système rétrograde de la proposition 9.4.10, et on arrête à l'instant $\nu = \inf\{t \leq T, u(t, X_t) = \psi(t, X_t)\}$.

9.4.4 Retour aux options américaines

D'après la proposition 9.4.2, le prix actualisé $\{\tilde{A}_t\}$ de l'option américaine est la \mathbb{P}^* -enveloppe de Snell de la suite $\{\tilde{Z}_t = (1+r)^{-t}h(S_t) = R_t^{-1}h(S_t)\}$. On sait (généralisation du corollaire 9.4.6) que

$$\tilde{A}_t = \sup_{\nu \in \mathcal{I}_t} \mathbb{E}^*(R_\nu^{-1}h(S_\nu) | \mathcal{F}_t),$$

soit

$$A_t = R_t \sup_{\nu \in \mathcal{I}_t} \mathbb{E}^*(R_\nu^{-1}h(S_\nu) | \mathcal{F}_t).$$

D'après la décomposition de Doob, $\tilde{A}_t = \tilde{M}_t - \tilde{C}_t$, avec $\{\tilde{M}_t\}$ une \mathbb{P}^* -martingale et \tilde{C}_t croissant prévisible et nul en 0.

Puisque le marché est complet, il existe une richesse initiale V_0 et une stratégie autofinancée $\{(X_t, Y_t)\}$ t.q. $V_T(X, Y) = R_T \tilde{M}_T$, soit $\tilde{V}_T(X, Y) = \tilde{M}_T$, et comme on a deux \mathbb{P}^* -martingales, $\forall 0 \leq t \leq T$, $\tilde{V}_t(X, Y) = \tilde{M}_t$, soit $\tilde{A}_t = \tilde{V}_t(X, Y) - \tilde{C}_t$, et $A_t = V_t(X, Y) - C_t$, où $C_t = R_t \tilde{C}_t$. Une date d'exercice

optimale τ vérifie $A_\tau = h(S_\tau)$. Elle doit vérifier $\tau \leq \nu_{\max} = \inf\{t, C_{t+1} \neq 0\}$, car en exerçant l'option à la date ν_{\max} , son propriétaire se constitue le capital $A_{\nu_{\max}} = V_{\nu_{\max}}(X, Y)$, et grâce à la stratégie $\{(X, Y)\}$, son portefeuille vaut strictement plus que l'option aux instants $\nu_{\max} + 1, \nu_{\max} + 2, \dots, N$.

On vérifie également que si l'acheteur de l'option exerce celle-ci à un instant non optimal, le vendeur réalise un profit strictement positif.

9.4.5 Options américaines et options européennes

Proposition 9.4.11. *Soit A_t le prix à l'instant t d'une option américaine qui rapporte à son détenteur Z_t si elle est exercée à l'instant t , et E_t le prix à l'instant t d'une option européenne qui rapporte à son détenteur Z_T à l'échéance. Alors $A_t \geq E_t$, $0 \leq t \leq T$.*

Si de plus $E_t \geq Z_t \forall t$, alors $E_t = A_t \forall t$.

PREUVE La première égalité est évidente, et elle résulte des propriétés de martingale (resp. sur-martingale) de $\{E_t\}$ (resp. $\{A_t\}$) sous \mathbb{P}^* . Si $E_t \geq Z_t$, $\{\tilde{E}_t\}$ est une \mathbb{P}^* -martingale (donc aussi surmartingale) qui majore $\{\tilde{Z}_t\}$, donc elle majore aussi $\{A_t\}$, d'après la proposition 9.4.2.

Corollaire 9.4.12. *Dans le cas des call(s) européen et américain de même échéance T et de même prix d'exercice K , portant sur un même unique actif risqué de prix S_t à l'instant t , $A_t = E_t$, $0 \leq t \leq T$.*

PREUVE On a $Z_t = (S_t - K)_+$, et

$$\begin{aligned} \tilde{E}_t &= R_T^{-1} \mathbb{E}^*((S_T - K)_+ | \mathcal{F}_t) \\ &\geq \mathbb{E}^*(\tilde{S}_T - R_T^{-1} K | \mathcal{F}_t) \\ &= \tilde{S}_t - R_T^{-1} K, \text{ donc} \\ E_t &\geq S_t - \frac{R_t}{R_T} K \\ &\geq S_t - K, \end{aligned}$$

mais on a aussi $E_t \geq 0$, donc $E_t \geq Z_t$. Il reste à appliquer la proposition. \square

Cette propriété n'est pas vérifiée pour un put, ni pour un call sur une action distribuant un dividende.

9.4.6 Options américaines et modèle markovien

Reprenons une option américaine qui rapporte à son détenteur $Z_t = h(S_t)$ si elle est exercée à l'instant t , et supposons maintenant que $\{S_t, 0 \leq t \leq T\}$ est une chaîne de Markov. Alors le prix A_t se met sous la forme $A_t = u(t, S_t)$. Posons $\tilde{u}(t, x) = R_t^{-1}u(t, x)$ et $\tilde{h}(t, x) = R_t^{-1}h(x)$. Il résulte de la proposition 9.4.10

$$\tilde{u}(t, x) = \tilde{h}(t, x) \vee \sum_y P_{xy} \tilde{u}(t+1, y),$$

d'où l'on déduit la formule de récurrence

$$u(t, x) = h(x) \vee \sum_y P_{xy} \frac{u(t+1, y)}{1+r}. \quad (9.9)$$

Et un temps d'exercice optimal est défini par

$$\nu = \inf\{t \leq T, u(t, S_t) = h(S_t)\}.$$

9.5 Options américaines dans le modèle de Black–Scholes

L'étude des options américaines dans le modèle de Black–Scholes exige des outils mathématiques complexes. Nous allons présenter l'EDP associée, par passage à la limite sur les formules de la sous-section 9.4.6.

Réécrivons la formule (9.9) dans le cadre de la sous-section 9.2.6, avec les changements de variable :

$$\begin{aligned} g(x) &= h(e^x), \\ v(t, x) &= u(t, e^x). \end{aligned}$$

On obtient

$$v\left(t - \frac{1}{N}, x\right) = g(x) \vee e^{-r/N} \left(p_+^N v\left(t, x + \frac{r}{N} + \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right) + p_-^N v\left(t, x + \frac{r}{N} - \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right) \right), \quad (9.10)$$

avec

$$\begin{aligned} p_+^N &= \mathbb{P}(\eta_k^N = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}) = \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{4\sqrt{N}} + o(N^{-3/2}), \\ p_-^N &= \mathbb{P}(\eta_k^N = -\frac{\sigma}{\sqrt{N}}) = \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{4\sqrt{N}} + o(N^{-3/2}). \end{aligned}$$

Posons

$$(A_N v)(t, x) e^{-r/N} \left(p_+^N v(t, x + \frac{r}{N} + \frac{\sigma}{\sqrt{N}}) + p_-^N v(t, x + \frac{r}{N} - \frac{\sigma}{\sqrt{N}}) \right).$$

Alors (9.10) se réécrit

$$\begin{aligned} v(t - \frac{1}{N}, x) &\geq g(x), \\ (A_N v)(t, x) - v(t - \frac{1}{N}, x) &\leq 0, \\ (v(t - \frac{1}{N}, x) - g(x))((A_N v)(t, x) - v(t - \frac{1}{N}, x)) &= 0. \end{aligned}$$

En admettant que v est suffisamment régulière, on obtient, après multiplication par N , à l'aide d'un développement limité, que quand $N \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} N[(A_N v)(t, x) - v(t - \frac{1}{N}, x)] &\rightarrow \\ Av(t, x) &:= \frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + (r - \frac{\sigma^2}{2}) \frac{\partial v}{\partial x}(t, x) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(t, x) - rv(t, x). \end{aligned}$$

Donc le prix de l'option américaine est

$$A_t = v(t, \log S_t),$$

où v est la solution de l'inéquation variationnelle

$$\begin{aligned} v(t, x) &\geq g(x), \\ Av(t, x) &\leq 0, \\ (v(t, x) - g(x))Av(t, x) &= 0, \end{aligned}$$

et un temps optimal d'exercice de l'option est donné par le temps d'arrêt

$$\nu = \inf\{t \leq T, v(t, \log S_t) = g(\log S_t) = h(S_t)\}.$$

9.6 Taux d'intérêt et obligations

Jusqu'ici nous avons supposé que le taux d'intérêt est une constante (ne dépendant ni de l'aléa ni du temps). Une telle hypothèse est acceptable lorsque l'on traite des actions et des options sur actions, mais ce n'est plus le cas lorsqu'il s'agit des obligations et des options sur obligations.

On appelle *obligation zéro coupon* un titre donnant droit à un Euro à l'échéance T . On notera $O_{t,T}$ la valeur de ce titre à l'instant t .

9.6.1 Courbe de taux en avenir certain

Le taux d'intérêt d'un prêt dépend à la fois de sa date d'émission t , et de la date d'échéance T . Une personne empruntant un Euro à l'instant t devra rembourser une somme R_T^t à la date T . Dans le cas du taux d'intérêt constant du modèle de Black-Scholes, on aurait

$$R_T^t = \exp[(T - t)r].$$

Plus généralement, dans un cadre déterministe, i.e. où toutes les quantités $\{R_T^t, 0 \leq t \leq T\}$ sont connues, l'absence d'opportunité d'arbitrage impose que la fonction R vérifie

$$R_T^t = R_u^t R_T^u, \forall 0 \leq t < u < T.$$

De cette relation, jointe à $R_t^t = 1$, et à la continuité de R , on déduit qu'il existe une fonction $t \rightarrow r(t)$ telle que

$$R_T^t = \exp\left(\int_t^T r(s)ds\right), \forall 0 \leq t \leq T.$$

Dans ce cas, on doit avoir clairement

$$O_{t,T} = \exp\left(-\int_t^T r(s)ds\right).$$

9.6.2 Taux en avenir incertain et obligations

On suppose maintenant que (on note R_t pour R_t^0)

$$R_t = \exp\left(\int_0^t r_s ds\right),$$

où $\{r_t, t \geq 0\}$ est un processus stochastique adapté à la filtration naturelle $\{\mathcal{F}_t, t \geq 0\}$ d'un mouvement brownien $\{W_t, t \geq 0\}$ (i. e. à des ensembles de mesure nulle près, $\mathcal{F}_t = \sigma\{W_s, 0 \leq s \leq t\}$). r_t est appelé le *taux instantané*.

On fait l'hypothèse suivante :

$$(H) \left\{ \begin{array}{l} \text{Il existe une probabilité } \mathbb{P}^* \text{ équivalente à } \mathbb{P} \text{ sous laquelle} \\ \tilde{O}_{t,u} := (R_t)^{-1} O_{t,u}, 0 \leq t \leq u \\ \text{est une martingale, } \forall 0 < u \leq T, \end{array} \right.$$

Puisque $O_{u,u} = 1$, $\tilde{O}_{u,u} = (R_u)^{-1}$, et donc (H) implique que

$$\begin{aligned}\tilde{O}_{t,u} &= \mathbb{E}^* \left(\exp \left[- \int_0^u r_s ds \right] \middle| \mathcal{F}_t \right), \quad \text{donc aussi} \\ O_{t,u} &= \mathbb{E}^* \left(\exp \left[- \int_t^u r_s ds \right] \middle| \mathcal{F}_t \right).\end{aligned}$$

Pour tenter d'expliciter plus avant la quantité $O_{t,u}$, il convient de préciser la dérivée de Radon–Nikodym de la probabilité \mathbb{P}^* par rapport à \mathbb{P} . Notons L_T cette densité. Elle est telle que pour toute v.a. bornée X ,

$$\mathbb{E}^*(X) = \mathbb{E}(X L_T).$$

Si de plus X est \mathcal{F}_t -mesurable, alors en posant $L_t = \mathbb{E}(L_T | \mathcal{F}_t)$, on a

$$\mathbb{E}^*(X) = \mathbb{E}(X L_t).$$

L_t est la densité de la restriction à \mathcal{F}_t de \mathbb{P}^* par rapport à \mathbb{P} . Il résulte du théorème de Girsanov (dont une partie a été démontrée ci-dessus à la section 9.3.8) la

Proposition 9.6.1. *Il existe un processus adapté $\{q_t, 0 \leq t \leq T\}$ vérifiant*

$$\int_0^T q_t^2 dt < \infty \quad p. s.,$$

tel que pour tout $0 \leq t \leq T$, p. s.

$$L_t = \exp \left(\int_0^t q_s dW_s - \frac{1}{2} \int_0^t q_s^2 ds \right).$$

Corollaire 9.6.2. *Le prix à l'instant t de l'obligation zéro-coupon d'échéance $u \geq t$ peut s'écrire*

$$O_{t,u} = \mathbb{E} \left(\exp \left[- \int_t^u \left(r_s + \frac{q_s^2}{2} \right) ds + \int_t^u q_s dW_s \right] \middle| \mathcal{F}_t \right).$$

PREUVE Posons $X = \exp(-\int_t^u r_s ds)$. Il faut calculer $\mathbb{E}^*(X | \mathcal{F}_t)$. Soit Y une v.a. \mathcal{F}_t -mesurable et bornée. On a

$$\begin{aligned}\mathbb{E}^*(XY) &= \mathbb{E}(XY L_T) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}[X L_T | \mathcal{F}_t] Y) \\ &= \mathbb{E}^* \left(\frac{\mathbb{E}[X L_T | \mathcal{F}_t]}{L_t} Y \right),\end{aligned}$$

donc d'après la caractérisation de $\mathbb{E}^*(X|\mathcal{F}_t)$,

$$\mathbb{E}^*(X|\mathcal{F}_t) = \frac{\mathbb{E}[XL_T|\mathcal{F}_t]}{L_t},$$

d'où le résultat.

Proposition 9.6.3. *Pour chaque échéance u , il existe un processus adapté $\{\sigma_t^u, 0 \leq t \leq u\}$ tel que sur $[0, u]$*

$$dO_{t,u} = (r_t - \sigma_t^u q_t)O_{t,u}dt + O_{t,u}\sigma_t^u dW_t.$$

PREUVE Utilisant d'abord la formule établie dans la dernière preuve, puis la propriété de martingale de $\{\tilde{O}_{t,u}, 0 \leq t \leq u\}$ sous \mathbb{P}^* , on obtient que pour $0 \leq s \leq t \leq u$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\tilde{O}_{t,u}L_t|\mathcal{F}_s) &= \mathbb{E}^*(\tilde{O}_{t,u}|\mathcal{F}_s)L_s \\ &= \tilde{O}_{s,u}L_s. \end{aligned}$$

Donc $\{\tilde{O}_{t,u}L_t, 0 \leq t \leq u\}$ est une martingale sous \mathbb{P} , qui est strictement positive, donc son log est une semimartingale, dont la partie martingale est de la forme

$$\int_0^t \theta_s^u dW_s,$$

et à nouveau puisque $\{\tilde{O}_{t,u}L_t, 0 \leq t \leq u\}$ est une \mathbb{P} -martingale,

$$\tilde{O}_{t,u}L_t = \tilde{O}_{0,u} \exp\left(\int_0^t \theta_s^u dW_s - \frac{1}{2} \int_0^t (\theta_s^u)^2 ds\right).$$

En multipliant par $R_t(L_t)^{-1}$, on obtient

$$O_{t,u} = O_{0,u} \exp\left(\int_0^t (r_s - [(\theta_s^u)^2 - q_s^2]/2) ds + \int_0^t (\theta_s^u - q_s) dW_s\right).$$

Le résultat s'en déduit en utilisant la formule d'Itô, et à condition de poser $\sigma_t^u = \theta_t^u - q_t$. \square

Si l'on rapproche la formule de la proposition de celle concernant le taux d'intérêt, à savoir

$$dR_t = r_t R_t dt,$$

on voit que l'obligation est "plus risquée" qu'un dépôt à la banque. Le terme $r_t - \sigma_t^u q_t$ est une sorte de rendement moyen relatif par unité de temps de l'obligation. Le terme $-\sigma_t^u q_t$ est la différence entre ce rendement et le taux sans risque. D'où l'interprétation de $-q_t$ comme une "prime de risque". Notons que sous la probabilité risque neutre \mathbb{P}^* , $W_t^* = W_t - \int_0^t q_s ds$ est un brownien standard, et

$$dO_{t,u} = r_t O_{t,u} dt + O_{t,u} \sigma_t^u dW_t^*.$$

9.6.3 Option sur obligation

Considérons pour fixer les idées une option européenne d'échéance T sur une obligation zéro coupon d'échéance T' , avec bien sûr $T \leq T'$. S'il s'agit d'un call de prix d'exercice K , la valeur de l'option à l'instant T est évidemment $(O_{T,T'} - K)_+$, et on va voir que l'on peut appliquer ici la même méthodologie qu'à la section 9.3.7.

L'évolution du portefeuille de couverture est donnée dans le cas d'une stratégie autofinancée par la formule

$$dV_t(X, Y) = X_t dR_t + Y_t dO_{t,T'}.$$

Définition 9.6.4. Une stratégie $\{(X_t, Y_t), 0 \leq t \leq T\}$ est admissible si elle est autofinancée et si la valeur actualisée

$$\tilde{V}_t(X, Y) = X_t + Y_t \tilde{O}_{t,T'}$$

du portefeuille correspondant est, pour tout t , positive et de carré intégrable sous \mathbb{P}^* .

Sous des hypothèses raisonnables, on peut couvrir une option européenne d'échéance $T < T'$.

Proposition 9.6.5. Supposons que $\sup_{0 \leq t \leq T} |r_t| < \infty$ p. s., $\inf_{0 \leq t \leq T} |\sigma_t^{T'}| > 0$, et $T < T'$. Soit H une v. a. \mathcal{F}_T -mesurable, telle que $H e^{-\int_0^T r_s ds}$ soit de \mathbb{P}^* carré intégrable.

Alors il existe V_0 et une stratégie admissible $\{(X, Y)\}$ tels que $V_T(X, Y) = H$. En outre

$$V_t(X, Y) = \mathbb{E}^* \left(e^{-\int_t^T r_s ds} H | \mathcal{F}_t \right).$$

PREUVE On a

$$\begin{aligned} d\tilde{V}_t(X, Y) &= Y_t d\tilde{O}_{t, T'} \\ &= Y_t \tilde{O}_{t, T'} \sigma_t^{T'} dW_t^*. \end{aligned}$$

On en déduit que $\{\tilde{V}_t, 0 \leq t \leq T\}$ est une \mathbb{P}^* -martingale, donc

$$V_t(X, Y) = e^{\int_0^t r_s ds} \mathbb{E}^* \left(e^{-\int_0^T r_s ds} H | \mathcal{F}_t \right).$$

Il reste à exhiber une stratégie correspondante. Il résulte du théorème de représentation d'Itô que

$$H e^{-\int_0^T r_s ds} = \mathbb{E}^* \left(H e^{-\int_0^T r_s ds} \right) + \int_0^T J_t dW_t^*,$$

avec un certain processus $\{J_t, 0 \leq t \leq T\}$ tel que $\int_0^T J_t^2 dt < \infty$ p. s. Il suffit alors de choisir

$$Y_t = \frac{J_t}{\tilde{O}_{t, T'} \sigma_t^{T'}}, \quad X_t = \mathbb{E}^* \left(H e^{-\int_0^T r_s ds} | \mathcal{F}_t \right) - \frac{J_t}{\sigma_t^{T'}}.$$

9.6.4 Un modèle de taux d'intérêt

On va examiner le modèle de *Vasicek*, qui est le plus simple (mais peut-être pas le plus satisfaisant). Dans ce modèle, le processus $\{r_t, 0 \leq t \leq T\}$ est solution de l'EDS

$$dr_t = a(b - r_t)dt + \sigma dW_t,$$

où a, b et σ sont des constantes positives, et q est lui-aussi constant, $q_t = -\lambda$. Alors si $W_t^* = W_t + \lambda t$, et $b^* = b - \lambda\sigma/a$, on a équivalamment

$$dr_t = a(b^* - r_t)dt + \sigma dW_t^*.$$

On montre aisément que r_t s'écrit

$$r_t = r_0 e^{-at} + b(1 - e^{-at}) + \sigma e^{-at} \int_0^t e^{as} dW_s,$$

et que r_t suit sous \mathbb{P} la loi

$$N \left(r_0 e^{-at} + b(1 - e^{-at}), \sigma^2 \frac{1 - e^{-2at}}{2a} \right),$$

et sous \mathbb{P}^* la même loi, avec b remplacé par b^* . Donc r_t prend une valeur négative avec probabilité non nulle, même si elle est éventuellement proche de 0.

Voyons maintenant le prix de l'obligation zéro-coupon.

$$\begin{aligned} O_{t,T} &= \mathbb{E}^* \left(e^{-\int_t^T r_s ds} | \mathcal{F}_t \right) \\ &= e^{-b^*(T-t)} \mathbb{E}^* \left(e^{-\int_t^T X_s ds} | \mathcal{F}_t \right), \end{aligned}$$

avec $\{X_s = r_s - b^*\}$ solution de l'EDS

$$dX_s = -aX_s ds + \sigma dW_s^*. \quad (9.11)$$

Alors

$$\mathbb{E}^* \left(e^{-\int_t^T X_s ds} | \mathcal{F}_t \right) = F(T-t, r_t - b^*),$$

où F est définie par

$$F(s, x) = \mathbb{E}^* \left(e^{-\int_0^s X_t^x dt} \right),$$

$\{X_t^x\}$ désignant la solution de l'EDS (9.11) qui vérifie $X_0 = x$. Comme $\int_0^s X_t^x dt$ est une v. a. r. gaussienne,

$$F(s, x) = \exp \left(-\mathbb{E}^* \int_0^s X_t^x dt + \frac{1}{2} \text{Var} \left[\int_0^s X_t^x dt \right] \right).$$

Or

$$\mathbb{E}^* \int_0^s X_t^x dt = x \frac{1 - e^{-as}}{a},$$

et

$$\text{Var} \left[\int_0^s X_t^x dt \right] = \int_0^s \int_0^s \text{Cov}(X_t^x, X_r^x) dt dr,$$

mais

$$\begin{aligned} \text{Cov}(X_t^x, X_r^x) &= \sigma^2 e^{-a(t+r)} \mathbb{E}^* \left(\int_0^t e^{as} dW_s^* \int_0^r e^{as} dW_s^* \right) \\ &= \sigma^2 e^{-a(t+r)} \frac{e^{2a(t \wedge r)} - 1}{2a}, \end{aligned}$$

d'où

$$\text{Var} \left[\int_0^s X_t^x dt \right] = \frac{\sigma^2 s}{a^2} - \frac{\sigma^2}{a^3} (1 - e^{-as}) - \frac{\sigma^2}{2a^3} (1 - e^{-as})^2.$$

Finalement

$$O_{t,T} = \exp(-(T-t)R(T-t, r_t)),$$

où $R(T-t, r_t)$, le taux d'intérêt moyen sur la période $[t, T]$, est donné par la formule

$$R(s, r) = R - (as)^{-1} \left[(R-r)(1 - e^{-as}) - \frac{\sigma^2}{4a^2}(1 - e^{-as})^2 \right],$$

avec $R = b^* - \sigma^2/2a^2$. R s'interprète comme un taux à long terme, qui est ici indépendant du "taux instantané spot" r . Cette dernière propriété est un défaut du modèle.

9.7 Exercices

Exercice 9.7.1. *A partir des mêmes inégalités à l'instant T , montrer que si C_t désigne le prix à l'instant t d'un call européen d'échéance T et de prix d'exercice K , sur un sous-jacent de prix $\{S_t\}$ dans le modèle de Black-Scholes,*

$$S_t - Ke^{-r(T-t)} \leq C_t \leq S_t.$$

Montrer que le prix du put européen P_t vérifie quant à lui

$$P_t \leq Ke^{-r(T-t)}.$$

Exercice 9.7.2. *Soit $\{S_t, 0 \leq t \leq T\}$ le prix d'un sous-jacent qui suit le modèle de Black-Scholes. On pose $U_t = \log S_t$. Dédurre de la formule d'Itô la forme de la différentielle de U_t , en fonction de dt et dB_t^* . On pose $v(t, y) = u(t, e^y)$, où $\{u(t, x)\}$ est la solution de l'EDP de Black-Scholes. Ecrire une EDP parabolique satisfaite par $\{v(t, y); 0 \leq t \leq T, y \in \mathbb{R}\}$.*

Exercice 9.7.3. *(Option "chooser") On considère une option sur une action $\{S_t, 0 \leq t \leq T\}$ (laquelle suit le modèle de Black-Scholes) qui fonctionne de la façon suivante : étant donnés $0 \leq t \leq T$ et $K > 0$, à l'instant 0, l'acheteur de l'option s'acquitte de la prime X_0 ; à l'instant t il choisit entre call et put; à l'instant T il a le droit d'exercer l'option choisie à l'instant t , au prix d'exercice K .*

1 *On note comme dans le cours C_t (resp. P_t) le prix du call (resp. du put) à l'instant t . Montrer que l'intérêt de l'acheteur est de choisir le call (resp. le put) si $C_t > P_t$ (resp. $P_t > C_t$). Vérifier à l'aide de la formule de parité call-put que $C_t \neq P_t$ p.s., sous \mathbb{P} comme sous \mathbb{P}^* .*

2 En déduire que l'option rapporte p.s. à son acheteur à l'instant T

$$\begin{aligned} H &= (S_T - K)_+ \mathbf{1}_{\{C_t \geq P_t\}} + (K - S_T)_+ \mathbf{1}_{\{C_t < P_t\}} \\ &= (S_T - K)_+ + (K - S_T) \mathbf{1}_{\{C_t < P_t\}} \\ &= (K - S_T)_+ + (S_T - K) \mathbf{1}_{\{C_t > P_t\}} \end{aligned}$$

3 On rappelle que la théorie générale des options nous indique que $X_0 = e^{-rT} \mathbb{E}^*(H)$. Ecrire les événements $F_t = \{C_t < P_t\}$ et $G_t = \{C_t > P_t\}$ en fonction de S_t , K et $r(T - t)$. Montrer que $e^{-rT} \mathbb{E}^*(S_T \mathbf{1}_{F_t}) = e^{-rt} \mathbb{E}^*(S_t \mathbf{1}_{F_t})$, et de même pour G_t .

4 En déduire des formules pour les quantités $X_0 - C_0$ et $X_0 - P_0$, que l'on explicitera sous une forme analogue à celle des formules pour C_0 et P_0 à la fin de la section 9.2.

5 Montrer que l'option "chooser" a la valeur $\max(C_t, P_t)$ à l'instant t . On note $\{u(s, x)\}$ la solution de l'EDP de Black-Scholes pour le call, $\{v(s, x)\}$ la solution de la même EDP pour le put (ces EDP ne diffèrent que par leur condition finale à l'instant T). On note enfin $\{w(s, x), 0 \leq s \leq t, x > 0\}$ la solution de la même EDP avec la condition finale $\sup(u(t, x), v(t, x))$ à l'instant t . Décrire un portefeuille de couverture pour l'option "chooser", à l'aide de ces trois quantités.

Exercice 9.7.4. Programmation On considère une option d'achat (call) européenne portant sur un sous-jaçant dont le cours à l'instant 0 est de 105 Euros, au prix d'exercice $K = 110$ Euros, à échéance d'un an, avec un taux bancaire à 5% (i.e. $rT = 0,05$), et une volatilité telle que $\sigma\sqrt{T} = 0,3$.

1 Calculer le prix du call en appliquant la méthode de Monte-Carlo à la formule

$$C_0 = \mathbb{E}^* \left[(S_T - Ke^{-rT})_+ \right],$$

avec 1 000 tirages. On prendra soin d'évaluer (de façon approchée) la variance de la v.a. dont on cherche à estimer l'espérance, et on donnera un intervalle de confiance pour la quantité cherchée.

2 Faire le même calcul (y compris l'intervalle de confiance) en combinant la même méthode appliquée à la formule pour le prix du put :

$$P_0 = \mathbb{E}^* \left[(Ke^{-rT} - S_T)_+ \right],$$

avec le même nombre de tirages, et la formule de parité call-put.

3 Calculer une troisième fois le prix de la même option d'achat, en utilisant cette fois la formule

$$C_0 = S_0 F(d_1) - Ke^{-rT} F(d_2),$$

avec

$$d_1 = \frac{1}{\sigma\sqrt{T}} \log\left(\frac{S_0}{K}\right) + \frac{r\sqrt{T}}{\sigma} + \frac{\sigma\sqrt{T}}{2},$$

$$d_2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{T}} \log\left(\frac{S_0}{K}\right) + \frac{r\sqrt{T}}{\sigma} - \frac{\sigma\sqrt{T}}{2},$$

et la fonction de répartition F de la $N(0, 1)$ fournie par Matlab.

4 Comparer les résultats avec ceux donnés par un "pricer" à trouver sur Internet.

5 Le prix du marché pour l'option ci-dessus étant de 15 Euros, en déduire la volatilité implicite (i.e. inverser la formule de Black-Scholes) en utilisant la méthode de Newton.

Exercice 9.7.5. Programmation Dans le modèle avec plusieurs sous-jacents de la section 9.3.10, on note C le prix du call de maturité T , de prix d'exercice K , portant sur un panier comportant a_i actions numéro i , $1 \leq i \leq d$, et P le prix du put correspondant, i. e. $C = E_0$ avec

$$h(x) = \left(\sum_{i=1}^d a_i x_i - K \right)_+,$$

et $P = E_0$ avec

$$h(x) = \left(K - \sum_{i=1}^d a_i x_i \right)_+,$$

avec E_0 la quantité définie par la formule (9.7). On demande d'appliquer la méthode de Monte Carlo au calcul du call dans le cas de cette option avec $d = 5$,

$$a = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 8 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}, S_0 = \begin{pmatrix} 80 \\ 95 \\ 105 \\ 75 \\ 35 \end{pmatrix}, K = 2000, rT = 0,05,$$

$$\sqrt{T}\Sigma = \begin{pmatrix} 0,3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,4 \end{pmatrix}.$$

1. Calculer le prix du call en appliquant la méthode de Monte-Carlo à la formule pour C_0 avec 1 000 tirages. On prendra soin d'évaluer (de façon approchée) la variance de la v.a. dont on cherche à estimer l'espérance, et on donnera un intervalle de confiance pour la quantité cherchée.
2. Préciser la formule de parité call-put dans ce cas. Faire le même calcul (y compris l'intervalle de confiance) en combinant la même méthode appliquée à la formule pour le prix du put P_0 avec le même nombre de tirages, et la formule de parité call-put. Comment les deux approches se comparent-elles ?
3. Quelles méthodes de variables antithétiques peut-on combiner avec la méthode de la question précédente ?

Bibliographie

- [1] S. Audic, J. M. Claverie : Self-identification of protein-coding regions in microbial genomes, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **95**, 10026–10031, 1998.
- [2] F. E. Benth : *Option theory with stochastic analysis*, Universitext, Springer, 2004.
- [3] N. Bouleau : *Probabilités de l'Ingénieur*, Hermann, 1986.
- [4] N. Bouleau : *Processus Stochastiques et Applications*, Hermann, 1988.
- [5] P. Bratley, B.L. Fox, E.L. Schrage : *A Guide to Simulation*, New York, Springer Verlag.
- [6] L. Breiman : *Probability*, Addison–Wesley, 1968. Réédition SIAM 1992.
- [7] P. Brémaud : *Point Processes and Queues*, Springer 1981.
- [8] E. Cinlar : *Introduction to Stochastic Processes*, Prentice Hall 1975.
- [9] W.G. Cochran : *Sampling Techniques*, John Wiley and Sons, 1977.
- [10] C . Coccozza–Thivent : *Processus stochastiques et fiabilité des systèmes* Mathématiques et Applications, **28**, Springer, 1997.
- [11] L. Devroye : *Non Uniform Random Variate Generation*, New York, Springer Verlag, 1986.
- [12] P. Diaconis, The Cut-off Phenomena in Finite Markov Chains, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, vol. **93**, 1659-1664, 1996.
- [13] P. Diaconis, K. Khare, L. Saloff–Coste, Gibbs-Sampling, Exponential Families, and Orthogonal Polynomials, Preprint.
- [14] C. B. Do, M. S. P. Mahabhashyam, M. Brudno, S. Batzoglou, ProbCons : Probabilistic consistency-based multiple sequence alignment, *Genome Research* **15**, 330–340, 2005.
- [15] R. Durbin, S. Eddy, A. Krogh, G. Mitchison, *Biological sequence analysis. Probabilistic models of proteins and nucleic acids*, Cambridge University Press, 1998.

- [16] W. Ewens, G. Grant, *Statistical methods in Bioinformatics*, Springer 2001.
- [17] J. Felsenstein, *Infering phylogenies*, Sinauer 2004.
- [18] P. Ferrari, A. Galves : *Construction of stochastic Processes, Coupling and Regeneration*, à paraître, <http://www.ime.usp.br/pablo>
- [19] W.R. Gilks, S. Richardson, D.I. Spiegelhalter : *Markov Chains Monte Carlo in Practice*, Chapman & Hall, 1996.
- [20] D. Goldberg : *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison–Wesley, 1989.
- [21] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb : *Monte Carlo Methods*, Chapman and Hall, 1964 .
- [22] J. H. Holland : *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, MIT Press, 1992.
- [23] F. Jelinek : *Statistical methods for speech recognition*, The MIT Press, 1997.
- [24] M. H. Kalos, P. A. Whitlock : *Monte Carlo Methods, volume I : Basics*, John Wiley and Sons, 1986.
- [25] S. Karlin, H. Taylor : *A second Course in Stochastic Processes*, Acad. Press 1981.
- [26] D.E. Knuth : *The Art of Computer programming*, Vol. 2 Seminumerical Algorithms, Addison-Wesley.
- [27] D. Lambertson, B. Lapeyre : *Introduction au calcul stochastique appliqué à la finance*, Mathématiques et Applications **9**, Ellipses, 1991.
- [28] B. Lapeyre, É. Pardoux, R. Sentis : *Méthodes de Monte–Carlo pour les équations de la physique*, Mathématiques et Applications **29**, Springer 1998.
- [29] M. Matsumoto, T. Nishimura : Mersenne Twister : A 623–dimensionally equidistributed uniform pseduorandom number generator, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* **8**, 3–30, 1998.
- [30] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller : Equations of state calculations by fast computing machines, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087–1092, 1953.
- [31] F. Muri–Majoube, B. Prum, Une approche statistique de l’analyse des génomes, *Gazette des Mathématiciens* **89**, 63–98, 2001.

- [32] M. Musiela, M. Rutkowski, *Martingale Methods in Financial Modeling : Theory and Applications*, Springer 1997.
- [33] R. Nielsen ed., *Statistical methods in Molecular Evolution*, Springer 2005.
- [34] J.R. Norris : *Markov chains*, Cambridge University Press, 1997.
- [35] W.H. Press, S.A. Teukolsky, B.P. Flannery, W.T. Vetterling : *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 1992.
- [36] J.G. Propp, D.B. Wilson : Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics, in *Proc. of the Seventh Int. Conf. on Random Structures and Algorithms*, Atlanta 1995, Vol **9**, 223–252, 1996.
- [37] B.D. Ripley : *Stochastic simulation*, Wiley 1987.
- [38] C. Robert : *Méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov*, Economica 1996.
- [39] P. Robert : *Réseaux et files d'attente : méthodes probabilistes*, Mathématiques et Applications **35**, Springer 2000.
- [40] S. Robin, F. Rodolphe, S. Schbath, *ADN, mots, modèles*, Belin 2003.
- [41] S. Ross : *Stochastic processes*, 2nd edition, John Wiley, 1996.
- [42] S. Ross : *Simulation*, 2nd edition, Acad. Press, 1997.
- [43] S. Ross : *Introduction to probability models*, Acad. Press, 2003.
- [44] R. Y. Rubinstein : *Simulation and the Monte Carlo Method*, John Wiley and Sons, 1981.
- [45] L. Saloff-Coste : Lectures on finite Markov chains, in *École de Probabilité de Saint-Flour XXVI*, Lecture Notes in Mathematics **1665** 301–413, Springer 1997.
- [46] R. Sedgewick : *Algorithms*, Addison–Wesley, 1987.

Index

- Burke, théorème de –, 244
- Dirichlet, forme de –, 221
- Doebelin, condition de –, 55
- Erlang, formule d'–, 245, 246
- Gibbs, échantillonneur de –, 87
- Hastings, algorithme d'–, 87
- homogène
 - chaîne de Markov –, 35
 - processus markovien –, 183
- irréductible
 - chaîne de Markov –, 43
 - processus markovien –, 195
- Itô, formule d'–, 289
- Itô, intégrale d'–, 287
- loi des grands nombres, 14
- matrice markovienne, 35
- Metropolis, algorithme de –, 87
- mouvement brownien, 285
- méthode de rejet, 20
- programmation dynamique, 123, 145, 150, 152
- temps d'arrêt, 40, 171
- théorème de la limite centrale, 14
- trou spectral, 222
- volatilité, 285
- état apériodique, 53
- état récurrent, 41, 195
 - nul, 47, 197
 - positif, 47, 197
- état transitoire, 41, 195