Stabilité des dynamiques markoviennes et comportement en temps long. Algorithmes stochastiques

Sébastien Gadat ¹

Version du 23 Février 2014
Institut Mathématiques de Toulouse
Université Paul Sabatier

^{1.} Ces notes sont en partie inspirées de documents transmis ou rédigés par P. Cattiaux, J.-F. Delmas, A. Guillin, F. Malrieu, F. Panloup.

Table des matières

1	Stal	oilisatio	on des chaînes de Markov	1			
	1.1	Espace	d'état finis	1			
		1.1.1	Quelques notations et définitions	1			
	1.2	Mesure	s invariantes $(E \text{ fini})$	2			
	1.3	Converg	gence $(E \text{ fini})$	4			
		1.3.1	Ergodicité	4			
		1.3.2	Apériodicité	4			
		1.3.3	Dynamique symétrique	5			
		1.3.4	Formulation variationnelle et forme de Dirichlet	7			
		1.3.5	Sortir du cas symétrique	8			
	1.4	Chaîne	de Markov à espace d'états dénombrables	9			
		1.4.1	Prolégomènes	9			
		1.4.2	Méthode de couplage	11			
		1.4.3	Théroème de Doeblin	12			
	1.5	Extensi	ions	13			
		1.5.1	Urnes d'Erhenfest	13			
		1.5.2	Protocole Aloha	14			
		1.5.3	Modèle de Fisher-Wright	16			
			Algorithme de Métropolis	17			
	1.6	Conclus	sion	19			
2	Stabilisation des processus de Markov 21						
	2.1	Semi-gr	roupe en temps continu	21			
		2.1.1	Introduction des concepts	21			
		2.1.2	Parallèle avec les chaines de Markov	22			
			Diffusion de Langevin-Kolmogorov	23			
	2.2	Existen	ace et unicité des mesures stationnaires	24			
		2.2.1	Non explosion	24			
		2.2.2	Unicité de la mesure stationnaire	26			
		2.2.3	Existence de mesures stationnaire	28			
		2.2.4	Controler les temps de retour dans les compacts	31			
	2.3	Vitesse	de convergence \dots	32			
		2.3.1	Convergence par inégalité fonctionnelle	32			
		2.3.2	Convergence par méthode de couplage	35			
	2.4	Extensi	ions	38			
		2.4.1	Processus d'Orstein-Ulhenbeck	38			

		2.4.2	Inégalités de Sobolev Logarithmiques et décroissance de l'entropie .	39		
		2.4.3	Diffusion de Kolmogorov	39		
		2.4.4	Équations de Fokker-Planck cinétiques	40		
		2.4.5	Modèle TCP	41		
3	\mathbf{Alg}	orithm	nes stochastiques	43		
	3.1	Introd	luction	43		
		3.1.1	Un premier exemple introductif			
		3.1.2	Modèle générique d'algorithme stochastique	45		
	3.2	Algori	ithmes déterministes et descente de gradient			
		3.2.1	Pas constant	46		
		3.2.2	Pas décroissant	48		
	3.3	Schém	na stochastique	51		
		3.3.1	Motivations	51		
		3.3.2	Rappels sur les martingales	52		
		3.3.3	Théorème de Robbins-Siegmund	54		
		3.3.4	Applications aux algorithmes stochastiques	55		
		3.3.5	Théorème Limite Central pour les Algorithmes Stochastiques	61		
	3.4	La mé	éthode de l'ODE	62		
		3.4.1	Attracteurs d'ODE	62		
		3.4.2	Interpolation du processus discret	63		
		3.4.3	Théorème de Kushner-Clark	64		
	3.5	Exten	sions	67		
		3.5.1	Problème du Bandits multi-bras	68		
		3.5.2	Réduction de variance par échantillonnage préférentiel	69		
		3.5.3	Moindres carrés récursifs & co	71		
4	Intr	Introductions aux méthodes bayésiennes 7				
			igme Bayésien	73		
		4.1.1	Modèle Statistique	73		
		4.1.2	Loi a posteriori	73		
	4.2	Consis	stance bayésienne	75		
		4.2.1	Formulation du résultat	75		
		4.2.2	Cas où Θ est fini	75		
		4.2.3	Cas où Θ est quelconque	78		
	4.3	Algori	ithme EM	80		
		4.3.1	Contexte	80		
		4.3.2	Méthode Itérative	80		
	4.4	Algori	ithme SA-EM	82		
		4.4.1	Motivations	82		
		4.4.2	Description de l'algorithme	83		
		4 4 3	Convergence de l'algorithme SA-EM	84		

5	Gra	ındes o	déviations de Freidlin & Wentzell	87
	5.1	Théor	ème de Schilder	87
		5.1.1	Principe de Grande Déviations	87
		5.1.2	Boite à outils pour les grandes déviations	88
		5.1.3	Théorème de Schilder	89
	5.2	Grand	les déviations de Freidlin & Wentzell à horizon fini	93
	5.3	Grand	les déviations des mesures invariantes	95
		5.3.1	Description du problème	95
		5.3.2	Classe d'équivalence et quasi-potentiel	95
			5.3.2.1 Définitions	95
			5.3.2.2 Résultats admis sur le quasi-potentiel	96
			5.3.2.3 Dynamique aléatoire autour des classes d'équivalence	97
		5.3.3	Le retour de la chaîne squelette	99
		5.3.4	Étude de la chaîne squelette	102
		5.3.5	Comportement de la mesure invariante	105
	5.4	Un pe	eu plus sur le quasi-potentiel	107
		5.4.1	Motivations et difficultés	107
		5.4.2	Équilibres instables	108
		5.4.3	Equation de Kolmogorov	109
	5.5	Descri	iption du spectre à basse température	
		5.5.1	Hypothèses	
		5.5.2	Inégalités de Poincaré et partition de l'espace	
		5.5.3	Estimation du spectre	
			5.5.3.1 Représentation de la première valeur propre	
			$5.5.3.2$ Étude sur D^c	
			5.5.3.3 Étude sur D	
			5.5.3.4 Retour sur le recuit simulé	117

Chapitre 1

Stabilisation des chaînes de Markov

1.1 Espace d'état finis

1.1.1 Quelques notations et définitions

Notation 1.1.1 (Espace d'états) On note E l'espace d'états fini de cardinal N.

Définition 1.1.1 (Transitions Q) $(X_n)_n$ est une chaine de Markov homogène à valeurs dans E de matrice de transition Q, c'est-à-dire

$$\mathbb{P}[X_{n+1} = j | X_n = i] := Q_{i,j}.$$

Dans tout ce paragraphe, on supposera que $(X_n)_n$ est une chaine irréductible, c'est à dire

$$\forall (x,y) \in E \qquad \exists \, n_{x,y} \qquad | \qquad Q_{x,y}^{n_{x,y}} > 0.$$

Remarque 1.1.1 Comme E est fini, la chaîne est donc récurrente puisqu'irréductible.

Notation 1.1.2 (\mathbb{P}_{μ} et \mathbb{E}_{μ}) On notera dans toute la suite \mathbb{P}_{μ} et \mathbb{E}_{μ} les probabilités et espérances conditionnellement au fait que X_0 est initialisée avec une loi μ .

Notation 1.1.3 (μg) De même, pour toute fonction réelle g définie sur E, μg est la moyenne de g selon μ :

$$\mu g := \sum_{x \in E} \mu(x)g(x).$$

Notation 1.1.4 (μQ) La multiplication à gauche de Q par un vecteur μ de \mathbb{R}^N correspond à

$$\forall i \in [1, N] \qquad (\mu Q)(j) = \sum_{i=1}^{N} \mu(i)Q_{i,j}$$

Cette notation prend particulièrement du sens lorsque μ est une distribution de probabilités puisqu'alors μQ correspond à la loi de X_1 lorsque $X_0 \sim \mu$.

Notation 1.1.5 (Qf) Lorsque f est une fonction de E, Qf désigne la multiplication à droite de Q par f:

$$\forall x \in E$$
 $(Qf)(x) = \sum_{j=1}^{n} Q_{x,j} f(j)$

Cette notation désigne principalement l'image de f par Q : c'est-à-dire la moyenne de $f(X_1)$ conditionnellement à $X_0 = x$.

Dans tout ce cours, on s'intéressera au comportement en temps long de la chaine $(X_n)_n$, de sa mesure $\mu_n := \mu Q^n$, et ce quelle que soit l'initialisation de X_0 .

Définition 1.1.2 (Mesure invariante π) On notera π une mesure invariante de $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une distribution de probabilités vérifiant l'équation de point fixe

$$\pi Q = \pi$$
.

On se retreindra par la suite aux situations où π n'est pas uniformément nulle.

Lorsque E est fini et irréductible, nous montrerons qu'il existe une et une seule mesure invariante pour la chaine de Markov. Ce genre de résultat se généralisera dans des solutions plus générales sous d'autres conditions. Enfin, l'étude de la stabilité de $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ consiste à regarder $d(\mu_n, \pi)$ lorsque $n \longrightarrow +\infty$.

1.2 Mesures invariantes (E fini)

Lemme 1.2.1 (Existence de mesure invariante, cas fini) Lorsque E est fini, il y a toujours existence de mesure invariante pour la chaîne de Markov homogène de transition Q.

<u>Preuve</u>: La démonstration est assez simple. On considère la suite ν_n définie par

$$\nu_n := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mu Q^k.$$

 $(\nu_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite de mesures de probabilités sur E. Comme E est fini, le simplexe \mathcal{S}_E des probabilités sur E est fermé et borné donc compact. On peut donc extraire de $(\nu_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une sous-suite convergente vers ν_{∞} . Cette mesure de probabilités satisfait

$$\nu_{\infty} = \nu_{\infty} Q,$$

en passant à la limite dans le calcul de $\nu_n Q$ puisque $\nu_n Q = \nu_n + \frac{1}{n} [\mu Q^n - \mu] Q$.

Lemme 1.2.2 Si Q est irréductible, alors toute mesure invariante π satisfait $\pi(x) > 0, \forall x \in E$.

<u>Preuve</u>: On sait que π est une mesure de probabilités donc $\exists x_0 \in E$ tel que $\pi(x_0 > 0$. Par ailleurs, pour tout $y \in E$, on a toujours un chemin joignant x_0 à y en un nombre fini $n_{x_0,y}$ d'étapes puisque la chaine est irréductible. Puis, on sait que $\pi = \pi Q^k$, pour tout entier k. Donc

$$\pi(y) = (\pi Q^{n_{x_0,y}})(y) \geqslant \pi(x_0)Q^{n_{x_0,y}}(x_0,y) > 0.$$

Cela permet de conclure la preuve.

Définition 1.2.1 (Forme de Dirichlet) Étant donnée une mesure π , on définit la forme de Dirichlet associée à la chaine Q comme

$$\mathcal{E}(f) := \frac{1}{2} \sum_{(x,y) \in E^2} \pi(x) Q(x,y) [f(x) - f(y)]^2 = \frac{1}{2} \mathbb{E}_{\pi} \left([f(X_1) - f(X_0)]^2 \right).$$

Lemme 1.2.3 Si f est une fonction harmonique (i.e. vérifiant Qf = f) et si la chaine est irréductible, alors f est constante.

<u>Preuve</u> : On sait que $\pi > 0$ sur E puisque la chaine est irréductible. On calcule la forme de Dirichlet :

$$2\mathcal{E}(f) = \mathbb{E}_{\pi} f^{2}(X_{1}) + \mathbb{E}_{\pi} f^{2}(X_{0}) - 2\mathbb{E}_{\pi} f(X_{1}) f(X_{0})$$

$$= 2[\pi f^{2} - \pi(f(Qf))]$$

$$= 2[\pi f^{2} - \pi(f^{2})]$$

$$= 0$$

Par ailleurs, si Q(x,y) > 0, alors f(x) = f(y) puisque $\mathcal{E}(f) = 0$. Par ailleurs, pour tout couple x, y, on peut trouver un chemin joignant x à y pour la transition Q et dans ce cas f(x) = f(y). Autrement dit, f est constante.

En utilisant le lemme précédent, on peut alors déduire le théorème important d'unicité de mesure invariante.

Théorème 1.2.1 Si E est fini et Q irréductible, il existe une unique mesure invariante pour la chaine.

<u>Preuve</u>: On sait qu'une mesure invariante au moins existe d'après le Lemme 1.2.1. Toute mesure invariante vérifie $\pi = \pi Q$ et donc π^t est un vecteur propre de Q^t associé à la valeur propre 1.

Par ailleurs, le lemme 1.2.3 nous montre que l'espace propre associé à la valeur propre 1 de Q est de dimension 1 et ne contient que les fonctions constantes. Ainsi, comme Q et Q^t ont des espaces propres qui ont les mêmes dimensions, on en déduit que l'espace propre de Q^t associé à la valeur propre 1 est de dimension 1. Ainsi, il n'y a qu'une mesure invariante puisque dans cet espace, il y a au plus une mesure de probabilités.

On peut donner d'autres preuves de ce résultat en utilisant un argument de retournement du temps. On y reviendra durant la description de l'algorithme de Metropolis-Hastings.

Quelques petites illustrations:

Exercice On considère une chaîne sur un espace $E = \{0, 1\}$ à deux éléments pour laquelle

$$Q = \left(\begin{array}{cc} 1 - a & a \\ b & 1 - b \end{array}\right).$$

- 1/ Identifier la mesure invariante.
- 2/ On initialise la chaîne sur la loi μ . Démontrer que

$$\mathbb{P}(X_n = 0) = \frac{b}{a+b} + (1-a-b)^n \left(\mu(0) - \frac{b}{a+b}\right).$$

3/ Retrouver la mesure invariante par le biais

1.3 Convergence (E fini)

Cette section aborde la question fondamentale de la convergence vers sa mesure stationnaire d'un processus irréductible et récurrent.

1.3.1 Ergodicité

Le premier résultat décrit une convergence au sens de Cesaro.

Théorème 1.3.1 (Théorème ergodique) i) Pour toute loi initiale μ , si E est fini et Q irréductible, alors les moyennes empiriques $\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mu Q^k$ convergent vers π .

ii) De même, pour toute fonction f, on a

$$\nu_n f := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Q^k f \longrightarrow \pi f \quad lorsque \quad n \longrightarrow +\infty.$$

<u>Preuve</u>: i) On sait que les valeurs d'adhérence de $(\mu_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sont invariantes, et comme il n'y a qu'une seule mesure invariante, on en déduit la convergence de $(\mu_n)_{n\in\mathbb{N}}$ vers π .

ii) De même, en considérant $f: E \mapsto \mathbb{R}$, on constate que les limites possibles de $\nu_n f$ sont nécessairement harmoniques donc constantes. $(\nu_n f)_{n \in \mathbb{N}}$ vit dans un espace compact puisque

$$\sup_{x \in E} Qf(x) = \sup_{x \in E} \sum_{y \in E} Q_{x,y} f(y) \leqslant ||f||_{\infty}.$$

Considérons une extraction φ telle que $\nu_{\varphi(n)}f \longrightarrow c$, où c est une constante. On sait que $\pi Q^k = \pi$ donc $\pi \nu_{\varphi(n)}f = \pi f$. Si on passe à la limite dans l'égalité précédente, on en déduit alors par convergence dominée que $\pi \nu_{\varphi(n)}f \longrightarrow \pi c = c$. Finalement, $c = \pi f$.

Il est difficile d'obtenir plus même dans le contexte où E est fini puisque si on se place sur $\{0,1\}$ avec comme matrice $Q=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, on ne peut espérer une convergence en loi vers la loi uniforme sur $\{0,1\}$ puisque $(X_{2p})_p$ et $(X_{2p+1})_p$ oscille en loi entre δ_{X_0} et δ_{1-X_0} .

1.3.2 Apériodicité

Définition 1.3.1 On note $M_{i,i} := \{n > 0 \mid Q_{i,i}^n > 0\}$ On définit la période d'un point i comme le plus grand commun diviseur de $M_{i,i}$.

Lorsque Q est irréductible, tous les points ont la même période. Sinon, ce résultat au sein de chaque classe d'irréductibilité.

Définition 1.3.2 (Apériodicité) On dit que Q est une chaine apériodique si la période de la chaine est 1.

En fait, l'hypothèse d'apériodicité + irréductibilité est équivalente à l'hypothèse d'irréductibilité forte :

$$\exists n_0 > 0 \quad \forall n \geqslant n_0 \quad \forall (x,y) \in E^2 \qquad Q^n(x,y) > 0.$$

On peut alors démontrer le résultat suivant.

Théorème 1.3.2 Si Q est fortement irréductible, alors il existe $\alpha \in (0,1)$ et c une constante positive telle que

$$\sup_{A \subset E} |\mu Q^n(A) - \pi(A)| := d_{VT}(\mu Q^n, \pi) \leqslant c\alpha^n.$$

1.3.3 Dynamique symétrique

La situation d'une dynamique symétrique joue un rôle relativement particulier dans le contexte des dynamiques markoviennes (chaines ou processus).

Définition 1.3.3 On dit que π est symétrique pour la dynamique de Q si

$$\forall (x, y) \in E^2$$
 $\pi(x)Q(x, y) = \pi(y)Q(y, x).$

On démontre facilement que si π est symétrique, alors elle est invariante, et dans le cas de chaine irréductible c'est donc la seule mesure invariante symétrique. Le point important est de ramener l'étude de μQ^n a une étude purement spectrale (et donc algébrique). Cela permet alors de calculer explicitement la puissance n-ième de Q.

Notation 1.3.1 (Produit scalaire \langle , \rangle_{π}) On munit l'ensemble des fonctions définies sur E d'une structure hilbertienne :

$$\langle f, g \rangle_{\pi} = \sum_{x \in E} f(x)g(x)\pi(x)$$

Lorsque π est symétrique pour Q, une remarque fondamentale est le calcul suivant :

$$\langle Qf, g \rangle_{\pi} = \sum_{x \in E} g(x)(Qf)(x)\pi(x)$$

$$= \sum_{x \in E} g(x) \left(\sum_{y \in E} Q(x, y) f(y) \right) \pi(x)$$

$$= \sum_{y \in E} f(y) \sum_{x \in E} g(x)\pi(x)Q(x, y)$$

$$= \sum_{y \in E} f(y) \sum_{x \in E} g(x)\pi(y)Q(y, x)$$

$$= \sum_{y \in E} f(y)\pi(y) \sum_{x \in E} Q(y, x)g(x)$$

$$= \sum_{y \in E} f(y)\pi(y)(Qg)(y)$$

$$= \langle f, Qg \rangle_{\pi}$$

Ainsi, Q est une matrice auto-adjointe pour \langle , \rangle_{π} . Elle est donc diagonalisable dans une base **orthonormée** de vecteurs propres ξ_1, \ldots, ξ_N , associés aux valeurs propres **réelles** $\lambda_1, \ldots, \lambda_N$. Le comportement de Q^n est donc guidée par la valeur propre de plus grand module.

Lemme 1.3.1 Lorsque Q est fortement irréductible et π -symétrique, le spectre de Q se décompose en $1 = \lambda_1 > \lambda_2 \geqslant \lambda_3 \dots \lambda_N > -1$.

<u>Preuve</u>: La preuve est très simple : on commence par ordonner par ordre décroissant les valeurs propres de Q. On sait que Q est une contraction de $\ell^{\infty}(\llbracket 1,n \rrbracket): \lVert Qf \rVert_{\infty} \leq \lVert f \rVert_{\infty}$, ce qui prouve :

$$\forall j \in [1, n] \qquad |\lambda_j| \leqslant 1.$$

Par ailleurs, 1 est valeur propre de Q associée au vecteur constant $\xi_1 = (1, ..., 1)$ et nous savons d'après le Lemme 1.2.3 que l'espace propre est de dimension 1.

Enfin, puisque Q est fortement irréductible, il existe n_0 tel que $Q^{n_0}(x,y) > 0$, pour tout couple (x,y). Un rapide calcul montre Q^{2n_0} est également une matrice à coefficients strictement positifs et donc Q^2 est également fortement irréductible. Ainsi, 1 est valeur propre de Q^2 d'ordre 1 et donc -1 ne peut être valeur propre de Q. Cela achève la preuve.

On peut alors énoncer le théorème fondamental suivant.

Théorème 1.3.3 Lorsque Q est fortement irréductible et π -symétrique, alors pour toute fonction f:

$$Var_{\pi}(Q^n f) \leq \rho^{2n} Var_{\pi}(f),$$

$$où \rho = |\lambda_2| \vee |\lambda_N| \ et \ Var_{\pi}(g) = \pi g^2 - (\pi g)^2 = \sum_{x \in E} \pi(x) [g(x) - \pi g]^2.$$

Ce théorème montre alors la convergence de $Q^n f$ vers πf à vitesse exponentielle. Quelle que soit la loi initiale μ , $\mathbb{E}_{\mu} f(X_n)$ se rapproche donc très rapidement de πf puisque $\pi Q^n = \pi$.

<u>Preuve</u>: Pour f donnée, on considère $g = f - \pi f$ et on montre que $Var_{\pi}(Q^n g)$ tend vers 0 à vitesse exponentielle. C'est évident : en effet, $\pi g = 0$ de sorte que g se décompose en

$$g = \sum_{i=2}^{N} \langle g, \xi_i \rangle_{\pi} \xi_i.$$

Donc

$$Q^n g = \sum_{i=2}^N \langle g, \xi_i \rangle_{\pi} \lambda_i^n \xi_i.$$

Finalement,

$$\langle Q^n g, Q^n g \rangle_{\pi} = \sum_{i=2}^N \langle g, \xi_i \rangle_{\pi}^2 \lambda_i^{2n} \leqslant \rho^{2n} \langle g, g \rangle_{\pi}.$$

Puis, on remarque que $\langle g,g\rangle_{\pi}=\pi g^2=Var_{\pi}(g)$ car $\pi g=0.$ De même, on a

$$\langle Q^n g, Q^n g \rangle_{\pi} = \pi (Q^n g)^2 = Var_{\pi}(Q^n g)$$

car $\pi Q^n g = \pi g = 0$, cela termine la preuve du thérorème.

On peut retravailler un petit peu la formulation du théorème précédent pour en déduire un résultat de convergence en variation totale de la loi de X_n vers π .

Corollaire 1.3.1 Si Q est π -symétrique et fortement irréductible, alors

$$d_{VT}(\mu_n, \pi) \leqslant \frac{\rho^n}{2\sqrt{\min_{x \in E} \pi(x)}}$$

En substance, on va démontrer que la convergence au sens L^2 entraine une convergence en variation totale. Ceci est vrai en utilisant un raisonnement du type

$$2d_{VT}(\mu,\nu) = \sum_{x \in E} |\mu(x) - \nu(x)| = \sum_{x \in E} \mu(x) \left| \frac{\nu(x)}{\mu(x)} - 1 \right| \le \sqrt{\sum_{x \in E} \left| \frac{\nu(x)}{\mu(x)} - 1 \right|^2 \mu(x)}$$

<u>Preuve</u>: On rappelle la définition de la distance en variation totale :

$$d_{VT}(\mu_n, \pi) := \sup_{A \subset E} |\mu_n(A) - \pi(A)|.$$

On considère donc un sous-ensemble A de E et on calcule

$$\mu_n(A) - \pi(A) = (\mu Q^n) 1_A - \pi 1_A = \mu(Q^n 1_A) - \pi 1_A = \langle \frac{\mu}{\pi}, Q^n 1_A \rangle_{\pi} - \langle 1_E, 1_A \rangle_{\pi}$$

Puis, on utilise la π -symétrie de Q et le fait que $Q^n 1_E = 1_E$ pour avoir que

$$\mu_n(A) - \pi(A) = \langle Q^n \frac{\mu}{\pi}, 1_A \rangle_{\pi} - \langle Q^n 1_E, 1_A \rangle_{\pi} = \langle Q^n (\frac{\mu}{\pi} - 1_E), 1_A \rangle_{\pi}$$
 (1.1)

On peut soustraire dans le membre de droite une fonction constante c puisque

$$\langle Q^n \left(\frac{\mu}{\pi} - 1_E \right), c \rangle_{\pi} = c \sum_{x \in E} \left[Q^n \left(\frac{\mu}{\pi} \right)(x) - 1 \right] \pi(x) = c \sum_{x \in E} (\pi Q^n)(x) \frac{\mu}{\pi} (x) - c = 0.$$

En choisissant alors $c = \pi(A)$ dans (1.1), on obtient

$$\mu_n(A) - \pi(A) = \langle Q^n(\frac{\mu}{\pi} - 1_E), 1_A - \pi 1_A \rangle_{\pi} \leqslant \sqrt{Var_{\pi}\left(Q^n \frac{\mu}{\pi}\right)} \sqrt{Var_{\pi}(1_A)},$$

et le théorème précédent assure que

$$\mu_n(A) - \pi(A) \leqslant \frac{\rho^n \sqrt{Var_\pi\left(\frac{\mu}{\pi}\right)}}{2}$$

puisque la variance de 1_A est majorée par 1/4. On peut alors conclure la preuve en écrivant que

$$Var_{\pi}\left(\frac{\mu}{\pi}\right) \leqslant \sum_{x \in E} \frac{\mu^{2}(x)}{\pi(x)} \leqslant \frac{\sum_{x \in E} \mu^{2}(x)}{\min_{x \in E} \pi(x)} \leqslant \frac{\sum_{x \in E} \mu^{2}(x)}{\min_{x \in E} \pi(x)} \leqslant \frac{1}{\min_{x \in E} \pi(x)}.$$

1.3.4 Formulation variationnelle et forme de Dirichlet

Dans la situation où Q est π -symétrique, on voit aisément que Q^2 est une matrice positive au sens où $\langle Q^2 f, f \rangle_{\pi} \ge 0$, la nullité n'étant alors possible que si $\langle f, 1_E \rangle_{\pi} = 0$ (f de moyenne nulle).

Définition 1.3.4 (Positivité) On dit que Q est positive lorsque pour toute fonction f de E, on a $\langle Qf, f \rangle_{\pi} \geq 0$.

Bien entendu, $\lambda_N \ge 0$ et on sait alors que $\rho = \lambda_2$. $1 - \rho$ est donc ici le trou de spectre entre la plus grande valeur propre 1 et la seconde plus grande λ_2 . La forme de Dirichlet est

$$\mathcal{E}(f) = \frac{1}{2} \mathbb{E}_{\pi} \left[f(X_1) - f(X_0) \right]^2 = \pi(f^2) - \pi(fQf) = \langle (Id - Q)f, f \rangle_{\pi}.$$

Bien entendu, on a $\mathcal{E}(f)=\sum_{i=2}^N(1-\lambda_i)\langle f,\xi_i\rangle_\pi^2$ et par le théorème de Pythagore, on a

$$\sum_{i=2}^{N} \langle f, \xi_i \rangle_{\pi}^2 = \|f\|_{\pi}^2 - \langle f, \xi_1 \rangle_{\pi}^2 = \langle f - \pi f, f - \pi f \rangle_{\pi} = Var_{\pi}(f).$$

Ainsi, on obtient l'inégalité de Poincaré :

$$\mathcal{E}(f) \geqslant (1 - \lambda_2) Var_{\pi}(f).$$

et la constante $c_P = 1 - \lambda_2$ est la meilleure (plus grande) constante telle que

$$Var_{\pi}(f) \leqslant \frac{1}{C}\mathcal{E}(f).$$

Dit autrement, la meilleure constante de décroissance exponentielle de la distance L^2 est aussi donnée par

$$1 - \rho := c_P := \sup_{f \mid \pi f = 0} \frac{\mathcal{E}(f)}{Var_{\pi}(f)}.$$

Plus c_P est grand et meilleure est la vitesse de convergence puisque ρ est très « décollé » de 1.

1.3.5 Sortir du cas symétrique

L'hypothèse de symétrie simplifie grandement l'étude de μQ^n . En réalité, dans le cas très particulier de E fini, les résultats continuent à être vrais même si Q n'est plus symétrique. Nous allons établir en effet le résultat suivant (déjà énoncé dans le théorème 1.3.2).

Théorème 1.3.4 Si E est fini et Q fortement irréductible, il existe $\alpha \in (0,1)$ et c une constante positive telle que pour toute mesure μ initiale

$$\sup_{A \subset E} |\mu_n(A) - \pi(A)| \leqslant c\alpha^n.$$

<u>Preuve</u>: Nous allons démontrer que pour toute fonction f de E, on a $Var_{\pi}(Q^n f) \leq \rho^n Var_{\pi}(f)$. On considère H l'hyperplan des fonctions de moyenne nulle intersecté avec la boule des fonctions de norme inférieure à 1:

$$H = \{ f : E \mapsto \mathbb{R} \mid \pi f = 0 \quad ||f||_{\pi} \le 1 \}.$$

Si g = Qf, alors $\pi g = \pi f = 0$ si f est dans H. De plus,

$$||g||_{\pi}^{2} = \sum_{x \in E} Qf(x)Qf(x)\pi(x) = \sum_{x \in E} \pi(x) \left(\sum_{y \in E} Q(x,y)f(y)\right)^{2}.$$

En utilisant à nouveau $\pi Q = \pi$ et l'inégalité de Jensen, on obtient alors

$$||g||_{\pi}^{2} \le \sum_{x \in E} \pi(x) \sum_{y \in E} Q(x, y) f(y)^{2} \le ||f||_{\pi}^{2}$$
 (1.2)

Ainsi, H est stable par Q. On considère alors la « norme »de Q^{n_0} définie par

$$\rho_{n_0} := \sup_{f \in H} \frac{\|Q^{n_0} f\|_{\pi}^2}{\|f\|_{\pi}^2}$$

H étant compact, on sait que cette borne supérieure est atteinte et nous savons que $\rho_{n_0} \leq 1$ d'après (1.2). Supposons donc $\rho_{n_0} = 1$, il existe g telle que $Var_{\pi}(Q^{n_0}g) = Var_{\pi}(g)$. On a donc égalité dans l'inégalité de Cauchy-Schwarz, ce qui implique alors que g est constante sur chaque support de $Q^{n_0}(x,.)$, mais ce support est E donc nécessairement g est constante, puis nulle, ce qui est impossible. Ainsi, $\rho_{n_0} < 1$ et

$$\forall k \in \mathbb{N}$$
 $\|Q^{n_0 k} f\|_{\pi}^2 \le \rho_{n_0}^k \|f\|_{\pi}^2$.

Par conséquent,

$$\forall n \in \mathbb{N}$$
 $||Q^n f||_{\pi}^2 \le (\rho_{n_0})^{n/n_0 - 1} ||f||_{\pi}^2$

On peut alors conclure en utilisant le même argument que dans la preuve du corollaire 1.3.1. Cependant, Q n'est pas supposé ici symétrique. Pour contourner cette difficulté, on peut introduire Q^* défini par

$$Q^*(x,y) = Q(y,x)\frac{\pi(y)}{\pi(x)}.$$

On peut rapidement constater que Q^* est l'adjoint de Q dans $\ell^2(\pi)$ et $\|Q^{*n} f\|_{\pi}$ possède également une décroissance exponentielle et adapter la preuve du corollaire 1.3.1.

1.4 Chaîne de Markov à espace d'états dénombrables

1.4.1 Prolégomènes

Objectifs La vocation de ce paragraphe est de présenter une méthode de preuve incontournable pour trouver des vitesses de convergence dans des situations pas nécessairement symétrique. Il s'agit des **méthodes de couplage**. Cette technique de preuve trouve de nombreux échos aussi bien dans les « conditions de Doeblin » que dans les méthodes « à la Meyn-Tweedie ». Par ailleurs, la technique de couplage n'a rien de très commun avec les méthodes spectrales présentées précédemment, et s'étend simplement aux situations en temps continu.

Ce qui n'est a priori plus vrai On va commencer à nouveau par rappeler qu'on se place dans une situation où Q est irréductible. Et on suppose par ailleurs qu'il y a au moins une mesure invariante. Cette hypothèse n'est bien sûr pas toujours réaliste : la marche aléatoire symétrique sur $\mathbb Z$ n'a que la mesure de comptage sur $\mathbb Z$ comme mesure stationnaire, et cette mesure ne peut être normalisée en mesure de probabilités.

Ce qui reste vrai Lorsque Q est irréductible et π invariante, alors π charge positivement tous les points de E, les fonctions harmoniques sont toujours constantes et la mesure de probabilité stationnaire pour Q est bien entendu unique.

Nous énonçons sans preuve quelques résultats classiques.

Proposition 1.4.1 i) Pour une chaine irréductible, tous les points de E ont la même période.

- ii) S'il existe pour chaque $x \in E$ un entier n(x) tel que $Q^n(x,x) > 0$ dès lors que $n \ge n(x)$, alors la chaîne est apériodique.
- iii) Réciproquement, si Q est irréductible et apériodique, elle satisfait la propriété précédente.
- iv) Si Q est irréductible sur E avec une mesure invariante, alors le temps d'atteinte de y satisfait :

$$\forall x \in E$$
 $\mathbb{P}_x (T_y = +\infty) = 0$

<u>Preuve de iv</u>: Nous démontrons d'abord le résultat pour y = x, c'est à dire pour le temps de retour en x. On note N(x) le nombre de passages en x de la chaine.

$$N(x) = \sum_{n \ge 1} 1_{X_n = x},$$

et bien sûr

$$\mathbb{E}_{\pi}N(x) = \sum_{n \ge 1} \pi(x) = +\infty.$$

On note T_x^k le temps de k-ième retour en x. La propriété de Markov forte implique que

$$\mathbb{P}_x \left(T_x^k < +\infty \right) = \mathbb{P}_x \left(T_x^1 < +\infty \right)^k := \alpha^k.$$

Puis,

$$\mathbb{E}_{\pi}N(x) = \sum_{y} \pi(y) \left(\sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{P}_{y}(T_{x}^{k} < +\infty) \right) = \sum_{y} \pi(y) \left(\sum_{k=1}^{\infty} \alpha^{k-1} \times \mathbb{P}_{y}(T_{x}^{1} < +\infty) \right)$$

Comme tout est positif, le théorème de Tonnelli implique que

$$\mathbb{E}_{\pi}N(x) = \frac{1}{1-\alpha}\mathbb{P}_{\pi}\left(T_x < +\infty\right).$$

Cela montre donc que $\alpha = 1$.

Étudions désormais le cas où $x \neq y$: $\mathbb{P}_y\left(T_x^1 < T_y^1\right) = \beta > 0$ sinon on ne pourrait jamais aller en x partant de y, ce qui est impossible car Q est irréductible. Ainsi, on a par la propriété de Markov que

$$\mathbb{P}_y\left(T_y^k < T_x^1\right) = (1 - \beta)^k.$$

Ainsi,

$$\lim_{k \to +\infty} \mathbb{P}_y \left(T_y^k < T_x^1 \right) = 0.$$

Comme on sait que $T_x^k \ge k$, on en déduit alors que

$$\lim_{k \to +\infty} \mathbb{P}_y \left(< T_x = +\infty \right) = 0.$$

1.4.2 Méthode de couplage

La méthode de couplage consiste à considérer non pas l'évolution trajectorielle d'une chaine de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ mais de deux chaines $(X_n,Y_n)_{n\in\mathbb{N}}$.

Un premier résultat de couplage permet de donner un résultat de convergence en loi de la chaine vers sa mesure stationnaire.

Théorème 1.4.1 Si Q est irréductible, apériodique et possède une unique mesure invariante π , alors pour toute loi initiale μ sur E dénombrable, on a

$$\sup_{A \subset E} |\mathbb{P}_{\mu}(X_n \in A) - \pi(A)| \longrightarrow 0 \qquad lorsque \qquad n \longrightarrow +\infty.$$

<u>Preuve</u>: On considère la chaine (X_n, Y_n) de transition $Q \otimes Q$ de loi initiale $\mu \otimes \pi$ et on considère le premier temps T où la chaine atteint la diagonale, *i.e.*

$$T := \inf \{ n \geqslant 0 \mid X_n = Y_n \}.$$

Fixons donc $x \in E$:

$$\mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x] = \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x, T > n] + \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x, T \leqslant n]
= \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x, T > n] + \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [T \leqslant n, \mathbb{P}_{(X_T, Y_T)} (X_{n-T} = x)]$$

où la dernier égalité provient de la propriété de Markov forte via le fait que T est fini p.s. Par ailleurs, on sait que $X_T = Y_T$ par définition du temps d'arrêt T et comme les chaînes (X_n) et Y_n ont même noyau de transition Q, on a alors que

$$\mathbb{P}_{(y,y)}(X_k = x) = \mathbb{P}_{(y,y)}(Y_k = x), \forall k \geqslant 0.$$

On a donc

$$\mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x] \qquad \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x, T > n] + \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} (T \leqslant n, \mathbb{P}_{(X_T, Y_T)} (Y_{n-T} = x))$$

$$= \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [X_n = x, T > n] + \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} (T \leqslant n, Y_n = x)$$

$$\leqslant \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} [T > n] + \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi} (Y_n = x).$$

Enfin, comme Y est initialisée sur sa loi invariante, on a

$$\forall n \geqslant 0$$
 $\mathbb{P}_{u \otimes \pi}(Y_n = x) = \pi(x).$

On retiendra surtout que $\mathbb{P}_{\mu \otimes \pi}[X_n = x] - \pi(x) \leq \mathbb{P}_{\mu \otimes \pi}[T > n]$ et comme on peut permutter le rôle de X et Y, on en déduit que

$$|\mathbb{P}_{\mu \otimes \pi}[X_n = x] - \pi(x)| \leq 2\mathbb{P}_{\mu \otimes \pi}(T > n).$$

Puis, on applique le iv) de la proposition précédente à la chaîne produit et au point $a=(z,z)\in E^2$: on sait qu'on atteint la diagonale presque sûrement puisque la chaine couplée est irréductible.

On peut également procéder à la même preuve en sommant sur les x de A pour obtenir exactement de la même manière $|\mathbb{P}_{\mu\otimes\pi}[X_n\in A]-\pi(A)|\leq \mathbb{P}_{\mu\otimes\pi}(T>n)$.

Remarquons une légère imprécision laissée de côté pour un soucis de simplicité de lecture : il faut en effet démontrer que la chaine couplée est irréductible dès lors que les chaines marginales sont irréductible **et apériodiques**. Ce point est laissé à la charge du lecteur.

1.4.3 Théroème de Doeblin

La vocation de ce fameux résultat est de donner une version quantitative du théorème précédent en proposant des vitesses de convergence.

Théorème 1.4.2 On suppose Q irréductible et telle qu'elle satisfait la condition de Doeblin pour un certain entier n_0 :

$$\exists m \in \mathfrak{M}_1^+(E) \quad \exists \alpha > 0 \quad \forall (x, z) \in E^2 \qquad Q^{n_0}(x, z) \geqslant \alpha m(z).$$

Alors, il existe c > 0 et $\rho < 1$ tels que

$$d_{VT}(\mu_n, \pi) \leqslant c\rho^n$$
.

Nota Bene : a priori, Q n'est pas irréductible. <u>Preuve</u> La preuve se déroule en trois étapes.

Étape 1 On se ramène d'abord au cas où $n_0 = 1$. Posons $P = Q^{n_0}$ et supposons qu'on sache démontrer que

$$d_{VT}(\mu P^k, \pi) \leqslant c\rho^k,$$

pour toute mesure initiale μ . Alors, on sait que pour $\mu Q^n = \mu Q^{kn_0+j} = \mu Q^j P^k$ par division euclidienne de n par n_0 . On note donc $\nu_j = \mu Q^j$, pour $j \in [1, n_0]$ et on sait qu'il existe c_j et ρ_j tels que

$$\forall k \in \mathbb{Z}$$
 $d_{VT}(\nu_j P^k, \pi) \leqslant c_j \rho_j^k$

En considérant alors $c = \bigvee_{j=1}^{n_0} c_j$ et $\rho = \bigvee_{j=1}^{n_0} \rho_j$, on montre facilement que

$$\sup_{A \subset E} |\mu Q^n(A) - \pi(A)| \leqslant \frac{c}{\rho} \left(\rho^{1/n_0}\right)^n$$

Étape 2 On va maintenant établir le résultat pour $n_0 = 1$ et on introduit un couplage. $F = E \times \{0, 1\}$ et $Z_n = (X_n, Y_n)$ est une chaine de Markov sur F définie par les transitions :

$$R((x,y),(x',1)) = \alpha m(x')$$
 et $R((x,y),(x',0)) = Q(x,x') - \alpha m(x')$.

La condition de minoration de Doeblin assure que R est un noyau de transition Markovien. Le temps de couplage est défini par

$$\tau = \inf \left\{ n \geqslant 1 \mid Y_n = 1 \right\}.$$

Comme $\mathbb{P}_{(x,y)}(Y_1=0)=1-\alpha$, alors $\mathbb{P}_{(x,y)}(Y_1=0,Y_2=0,\ldots Y_n=0)=(1-\alpha)^n$ et τ est p.s. fini. Ensuite, on voit facilement que

$$\mathbb{P}_{(x,0)}(X_{\tau} = x') = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}_{(x,0)}(Y_1 = \dots, Y_{n-1} = 0, Y_n = 1, X_n = x') = \sum_{n=1}^{\infty} (1-\alpha)^{n-1} \alpha m(x') = m(x').$$

De même,

$$\mathbb{P}_{(x,0)}(X_n = x', \tau \leqslant n) = \sum_{k=1}^n \mathbb{P}_{(x,0)}(\tau = k) \times \mathbb{P}_{X_{\tau,1}}(X_{n-k} = x') = \sum_{k=1}^n (1-\alpha)^{k-1} \alpha(mQ^{n-k})(x').$$

Cette dernière expression est d'ailleurs indépendante de x, le point d'initialisation une fois que la chaine a couplé (Y = 1). La probabilité précédente est notée p(x', n).

Étape 3 On considère $A \subset E$ et deux lois initiales μ et ν . On a

$$(\mu Q^{n})(A) - (\nu Q^{n})(A) = \mathbb{P}_{\mu}(X_{n} \in A) - \mathbb{P}_{\nu}(X_{n} \in A)$$

$$= \sum_{x \in E, x' \in A} \mathbb{P}_{(x,0)}(X_{n} = x')[\mu(x) - \nu(x)]$$

$$= \sum_{x \in E, x' \in A} \mathbb{P}_{(x,0)}(X_{n} = x', \tau > n)[\mu(x) - \nu(x)]$$

$$+ \sum_{x \in E, x' \in A} \mathbb{P}_{(x,0)}(X_{n} = x', \tau \leq n)[\mu(x) - \nu(x)]$$

$$= \sum_{x \in E, x' \in A} \mathbb{P}_{(x,0)}(X_{n} = x', \tau > n)[\mu(x) - \nu(x)] + \sum_{x \in E, x' \in A} [\mu(x) - \nu(x)]p(x', n)$$

$$= \sum_{x \in E, x' \in A} \mathbb{P}_{(x,0)}(X_{n} = x', \tau > n)[\mu(x) - \nu(x)] \quad \text{couplage}$$

$$\leq (1 - \alpha)^{n} \sum_{x \in E} |\mu(x) - \nu(x)|$$

On en déduit alors par symétrie que

$$d_{VT}(\mu Q^n, \nu Q^n) \le (1 - \alpha)^n. \tag{1.3}$$

En considérant $\nu = \mu Q^k$, on déduit que $(\mu Q^n(A))_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de Cauchy donc convergente vers $\pi(A)$. En passant à la limite sur k dans (1.3), on obtient alors la conclusion.

1.5 Extensions

Les exemples suivants pourront être considérés lors d'une étude personnelle puis faire l'objet d'un petit travail de synthèse exposé en fin de cours. Les plans suivants ne sont aucunement impératifs, tout comme leur contenu. Certains sont sans doute plus éloignés du cours ci-dessus que d'autres.

1.5.1 Urnes d'Erhenfest

A - Bibliographie Ce modèle est décrit précisément dans les ouvrages :

[FF02] D. Foata et A. Fuchs *Processus stochastiques*, Dunod, 2002.

[KS60] J. G. Kemeny et J. L. Snell *Finite markov chains*, Van Nostrand, 1960. ou dans l'article

[K47] MARK KAC Random Walk and the Theory of Brownian Motion, The American Mathematical Monthly, Vol. 54, No. 7, Part 1, 369-391.

B - Modèle et Premières propriétés N particules sont placées dans 2 récipients A et B. A chaque instant, on choisit une particule au hasard et on la change de récipient. On appelle X_n le nombre de particules dans le récipient A au temps n.

Établir que X_n est une chaîne de Markov et écrire sa matrice de transition. Donner les caractéristiques dynamiques de la chaîne de Markov.

C - Équilibre Montrer que la loi binomiale donnée par

$$\forall k \in [0, N] \qquad \pi_N(k) = C_N^k 2^{-N}$$

est symétrique pour le modèle.

D - Théorique et Pratique

- Programmer des scripts Matlab générant des trajectoires de telles chaînes (en partant par exemple d'une distribution initiale μ_0 qui est une masse de dirac en un certain k_0).
- Tracer sur un même graphique l'histogramme empirique des (X_i) obtenus à la question précédente, et la distribution de probabilité invariante b_N . Quel résultat illustret-on ainsi?
- A-t-on convergence de X_n vers μ ? On définit la mesure μ_n par

$$\mu_n = \frac{(\mu_0 + \mu_0 P + \dots + \mu_0 P^n)}{n}$$

Tracer sur le même graphique les courbes $n \longmapsto |\mu_0 P^n - \mu|_{L^1}$ et $n \longmapsto |\mu_n - \mu|_{L^1}$. Qu'observe-t-on?

E - Théorique Proposer une décomposition spectrale de la matrice de transition. À quelle condition sur la distribution initiale a-t-on convergence vers π_N ?

1.5.2 Protocole Aloha

A - Bibliographie On consultera avec profit la référence suivante :

[B99] P. Brémaud Markov Chains: Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues Series: Texts in Applied Mathematics, Vol. 31, Springer, 1999.

Le point clef de l'étude consiste en l'utilisation d'une propriété de stabilité, à savoir le théorème de Foster-Lyapunov et un de ses corollaires, le lemme de Pake. Nous serons également amené à utiliser un critère proche pour les processus à temps continu.

B - Modélisation du protocole de communication Ce protocole décrit un canal de transmission de données partagées entre de nombreux utilisateurs. Les utilisateurs, chacun avec un message, désirent accéder à <u>un seul</u> canal de communication pour transmettre leur message. Voici comment ce canal de communication fonctionne.

Les transmissions sont découpées en paquets (slots en anglais) de taille fixe. Le temps est donc discrétisé, chaque unité de temps permettant l'émission d'un paquet. Les utilisateurs sont synchronisés sur ces temps. Le canal lui-même ne peut laisser passer qu'une seule émission à la fois et le temps nécessaire à la transmission du message est considéré négligeable ou petit devant l'intervalle de temps disponible pour la transmission. Par conséquent, si deux messages ou plus sont émis en même temps dans le canal, ceux-ci collisionnent et aucun des messages n'est alors transmis. A tout instant, les stations émettrices dispose des informations suivantes :

- le canal est silencieux (aucune émission)
- le canal transmet avec succés une émission

- plusieurs émissions simultanées échouent (on entend du bruit). Dans ce dernier cas, les stations émettrices sont bloquées et le paquet refusé est en attente.
- Il faudra par conséquent retenir que :
- 1. Les messages ne peuvent être transmis qu'à des temps également espacés. L'intervalle de temps constant entre deux temps d'emission potentielle est appelé *slot* et est suffisant pour la transmission d'**un** message.
- 2. Tous les messages bloqués nécessitent une retransmission et cette retransmission est décidée, indépendamment des autres messages en attente et des événements passés avec une probabilité $\nu \in]0;1[$. Cette étape de retransmission suit une loi de Bernoulli.
- 3. Tous les nouveaux messages se présentant pour la première fois aux utilisateurs sont immédiatement passés dans le canal.
- C Mise en équation On notera X_n le nombre de messages en attente de retransmission au temps n et le nombre d'arrivée de nouveaux messages au temps n est A_n . Ces variables aléatoires A_n sont décrites par un processus de variables aléatoires i.i.d. de distribution μ satisfiant

$$\forall n \in \mathbb{N}^* \qquad \mathbb{E}A_n = \lambda,$$

où λ est alors appelé <u>intensité du traffic</u>.

Conditionnellement au fait que k messages sont en attente au slot n, calculer la probabilité $b_k(i)$ que i d'entre-eux soient re-émis au slot suivant. Établir que X_n est une chaine de Markov dont on donnera la matrice de transition.

- **D Théorique et Numérique** Simuler des trajectoires de X_n dans le cas où la distribution μ est une loi de Poisson de paramètre λ . Ces simulations correspondent au cas non stabilisé. La procédure prendra en argument le paramètre λ ainsi que la probabilité de re-émission ν . Démontrer que le processus X_n n'est pas stabilisé, c'est-à-dire qu'il n'est pas récurrent positif.
- **E Outil** Ce modèle est une illustration de la théorie des fonctions de Lyapunov pour les chaines de Markov. On démontrera le lemme suivant.

Théorème 1.5.1 (Lemme de Pake) Soit X_n une chaîne de Markov homogène irréductible sur E dénombrable vérifiant

$$\mathbb{E}\left[X_{n+1}|X_n=i\right]<+\infty$$

et tel que

$$\limsup_{i \to \infty} \mathbb{E}\left[X_{n+1} - X_n \middle| X_n = i\right] < 0$$

alors la chaîne est récurrente positive.

F - **Théorique** Pour contourner le problème d'instabilité, il parait naturel de jouer sur les paramètres du système, en particulier celui de re-émission ν .

On fait évoluer le nouveau système en modifiant la règle de Bernoulli dépendant du nombre k de messages en attente. On a alors $\nu = \nu(k)$. Sachant qu'au slot n le nombre

de messages en attente est i, appliquer le lemme de Pake et démontrer qu'on doit établir $\lambda \leq g_i(\nu(i)) - \epsilon$ pour $\epsilon > 0$ avec

$$g_k(\nu) = (1 - \nu)^k \mu(1) + k\nu(1 - \nu)^{k-1} \mu(0)$$

Trouver le choix optimal pour ν . Quelle condition doit-on imposer sur λ pour que le protocole ALOHA soit stable?

1.5.3 Modèle de Fisher-Wright

A - Bibliographie Les ouvrages suivants semblent incontournables :

[DJ06] J.-F. DELMAS ET B. JOURDAIN Modèles aléatoires: applications aux sciences de l'ingénieur et du vivant, Mathématiques & Applications, vol. 57, Springer-Verlag, 2006.

[D08] R. Durrett Probability models for DNA sequence evolution, Probability and its Applications (New York), Springer, New-York, 2008.

On pourra également consulter :

[EK86] S. ETHIER ET T. KURTZ Markov Processes, Characterization and convergence, Wiley series in probability and mathematical statistics, New-York, 1986.

[N98] J. R. Norris *Markov chains*, Cambridge University Press, 1998.

- **B Modélisation** On souhaite étudier l'évolution de la fréquence d'un allèle dans une population de petite taille pour un gène se présentant sous deux allèles A et B seulement. On suppose que chaque individu possède un seul exemplaire du gène, sous la forme d'un des deux allèles A ou B et qu'il le transmet à ses descendants (on parle de population haploïde). Présentons le cadre de notre modèle :
 - le gène considéré se présente sous deux allèles distincts A et B,
 - la taille de la population reste constante au cours du temps, égale à 2N,
 - les générations ne se chevauchent pas : à chaque instant k, la k-ième génération donne naissance aux 2N individus de la (k+1)-ième génération et meurt,
 - chacun des enfants choisit son parent uniformément parmi tous les individus de la génération précédente et indépendamment des autres,
 - la reproduction à l'instant k ne dépend pas des reproductions précédentes.
- C Mise en équation On note X_n le nombre d'allèles A dans la population à la génération n. Au vu des hypothèses ci-dessus, justifier la considération d'une suite de variables aléatoires $(X_n)_{n\geqslant 0}$ à valeurs dans S=0,1,...,2N construite de la façon suivante :

$$\mathcal{L}(X_{n+1}|X_n, X_{n-1}, ..., X_0) = \mathcal{B}(2N, \frac{X_n}{2N}).$$

Décrire la chaîne de Markov, identifier les états absorbants, interpréter rapidement. Le phénomène d'absorption appelé perte de diversité allélique, doit être ici décrit et quantifié.

D - Absorption On peut étudier tout d'abord les positions d'absorption possible. On pourra par exemple démontrer le théorème suivant

Théorème 1.5.2 Conditionnellement à $X_0 = i \in [1, 2N - 1]$, la chaîne est absorbée en N avec probabilité i/2N.

De même, on peut s'intéresser au temps d'absorption partant de $X_0 = i$. On définit $m_{2N}(i)$ le temps moyen d'absorption. En utilisant la propriété de Markov, écrire une équation implicite sur les $(m_{2N}(j))_{j \in [0,2N]}$.

E - Numérique et Théorique Proposer une méthode Monte-Carlo afin d'approcher les valeurs de m_{2n} .

Lorsque le nombre N de personnes dans la population tend vers l'infini, il est possible d'approcher les valeurs prises par la fonction m_{2n} en considérant $Z_n = X_n/2N$. Démontrer le résultat suivant :

Théorème 1.5.3 Si $z \in [0,1]$ est tel que $Z_0 = z$ et $(i_N)_{N \ge 0}$ est une suite d'entiers telle que i_N/N converge vers z quand N tend vers l'infini. Alors

$$m_N(i_N) \sim -2N(z \log z + (1-z) \log(1-z)).$$

F - Modélisation, Numérique et Théorique pour aller plus loin On souhaite prendre en compte un effet de sélection naturelle. On supposera que cette sélection naturelle provient d'une faculté d'adaptation et que cette adaptation ne dépend que du facteur allélique d'intérêt (modélisation certainement très réductrice).

Proposer un modèle où un individu porteur de l'allèle A à 1+s fois plus de chance de survivre que l'individu B.

Calculer alors les probabilités de lieu d'absorption (toujours 0 ou 2N). Quantifier l'effet de la sélection s lorsque s est de l'ordre 1/2N.

1.5.4 Algorithme de Métropolis

- A Bibliographie Difficile de faire une liste exhaustive tant le sujet est vaste! Une analyse probabiliste fine se trouve dans les travaux de P. Diaconis et G. Lebeau.
- [B99] P. Brémaud Markov Chains: Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues Series: Texts in Applied Mathematics, Vol. 31, Springer, 1999.
- [DSC98] P. DIACONIS ET L. SALOFF-COSTE, What do we know about the metropolis algorithm Jour. Comp. and Syst. Sci., 57:20-36, 1998.
- [D09] P. DIACONIS, The markov chain monte carlo revolution. Bull AMS, 46 (2009), 179-205.
- [H88] B. Hajeck, Cooling schedules for optimal annealing. Math. Oper. Res, 13, 311-329, (1988).
- [L09] G. LEBEAU, Introduction à l'analyse de l?algorithme de Metropolis, Cours disponible http://math.unice.fr/~sdescomb/MOAD/CoursLebeau.pdf
- [Y02] B. YCART, *Modèles et algorithmes markoviens*, Mathématiques et Applications, volume 39, Springer, septembre 2002.
- **B Motivations** Une des applications les plus spectaculaires des chaines de Markov sur un espace d'états fini (en particulier de leur comportement en temps long) a sans aucun doute été l'optimisation combinatoire, à travers ce qu'on appelle les algorithmes de (Hastings-)Metropolis et de recuit simulé (simulated annealing).

Étant donnée une distribution de probabilités π définie sur un espace d'états E, la question étudiée par la méthode de Metropolis est de trouver un algorithme simulant une approximation de cette distribution π en temps raisonnable.

Dans la situation particulière où π_{β} s'écrit sous forme de champs de Gibbs $\pi_{\beta} \propto e^{-\beta U}$ avec U un potentiel explicitement connu et $\beta > 0$. On parle alors d'algorithme de Metropolis-Hastings. Comme on peut toujours se ramener à cette situation, il est légitime de se retreindre à cette étude. On fera l'hypothèse simplificatrice que tout état x appartient à E fini. Trouver un contexte pertinent où une simulation directe est impossible et l'approximation Metropolis est incontournable (problème des N corps, voyageur du commerce, ou autre).

 ${\bf C}$ - **Algorithme** On suppose donnée une matrice de transition P sur E vérifiant l'hypothèse de Doeblin. On impose en plus l'hypothèse de « réversibilité » de la chaîne

$$P(x,y) > 0 \Longleftrightarrow P(y,x) > 0 \tag{1.4}$$

La stratégie adoptée consiste alors à :

- On tire X_0 quelconque dans E.
- Étant donné une réalisation $X_n = x_n$, on tire $Y_{n+1} = y_{n+1}$ selon la loi $P(x_n, .)$.
- On calcule le quotient

$$\rho_n = \frac{\pi_{\beta}(y_{n+1})P(y_{n+1}, x_n)}{\pi_{\beta}(x_n)P(x_n, y_{n+1})}$$

- On choisit alors $X_{n+1} = y_{n+1}$ avec la probabilité $1 \wedge \rho_n$ et sinon on pose $X_{n+1} = x_n$. Décrire le comportement en temps long de la chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$.
- **D** Théorique et pratique L'objectif d'un tel algorithme est d'obtenir une minimisation asymptotique de l'énergie U. L'idée est de considérer une famille de lois de probabilités sur E qui « convergent » vers des masses de Dirac en les minima de U. Les lois de probabilités sont exactement les π_{β} introduites dans le précédent paragraphe. On notera m le minimum de \mathcal{E} (pas nécessairement unique).

Démontrer que lorsque β tend vers $+\infty$, les distributions π_{β} chargent principalement les minima de \mathcal{E} . Proposer une implémentation numérique pertinente de l'algorithme de Metropolis-Hastings avec un grand β . Illustrer numériquement le point théorique précédent.

E - Recuit Simulé - Théorique et Pratique On cherche désormais à rendre $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ inhomogène en temps en faisant varier (grandir) β avec n. On suppose que P est une matrice de transition décrivant des lois uniformes sur les voisinages de chaque état de E. Préciser les transitions. Étudier le spectre de la chaine de Markov à basse température, c'est-à-dire lorsque $T = 1/\beta = o(1)$. Montrer la convergence en choisissant judicieusement le schéma de température constant par palier.

Programmer sur un exemple pertinent un algorithme de recuit simulé. Illustrer le fait qu'une décroissance trop rapide de la température ne résout pas le problème d'optimisation.

1.6 Conclusion

Dans le chapitre suivant, nous décrivons en temps continu un parallèle au cas des chaines de Markov en essayant de retrouver les objets utilisés dans ce chapitre. Entre autres choses, il s'agit du noyau de transition, de la forme de Dirichlet, la théorie spectrale ou les méthodes de couplage.

Chapitre 2

Stabilisation des processus de Markov

2.1 Semi-groupe en temps continu

2.1.1 Introduction des concepts

On note E l'espace d'état, μ une mesure sur E

On définit un semi-groupe $(P_t)_{t\geqslant 0}$ qui va mimer en temps continu le rôle des probabilités de transition pour les chaines de Markov.

Définition 2.1.1 (Semi-groupe) On définit un semigroupe de Markov sur E noté $(P_t)_{t\geq 0}$ comme une famille de noyaux de probabilités dépendant d'un paramètre $t \in \mathbb{R}_+$, vérifiant

$$\forall (t,s) \in \mathbb{R}^2_+$$
 $P_0 = Id$ et $P_t \circ P_s = P_{t+s}.$

Ce semi-groupe est entièrement décrit par son action sur les fonctions mesurables boréliennes :

$$P_t f(x) = \int_{y \in E} f(y) P_t(x, dy).$$

Remarque 2.1.1 Cette définition est à rapprocher de l'action de Q sur les fonctions sur E pour les chaines de Markov.

On ne considèrera ici que les semi-groupes Fellerien : pour toute fonction $f, t \mapsto P_t f$ est continue de \mathbb{R}_+ dans $L^2(\mu)$.

Étant donné ce semi-groupe, on associe un processus markovien $(X_t)_{t\geqslant 0}$. Ce processus mime la dynamique de chaîne de Markov :

$$\mathbb{E}[f(X_t)|X_0 = x] = P_t f(x).$$

On définit alors les mesures stationnaires.

Définition 2.1.2 (Mesures stationnaires pour $(P_t)_{t\geqslant 0}$) μ est invariante pour le semigroupe si pour toute fonction f on a

$$\int_{x \in E} P_t f(x) d\mu(x) = \int_{x \in E} f(x) d\mu(x).$$

Ce qui se récrit en $\mu(P_t f) = \mu(f)$.

L'action en tout temps des transitions dans P_t laisse donc invariante μ au travers de l'intégrale sur les fonctions de E.

Définition 2.1.3 Le générateur infinitésimal \mathcal{L} associé au semi-groupe $(P_t)_{t\geqslant 0}$ est défini par

 $\mathcal{L}f = \lim_{t \to 0} \frac{P_t f - f}{t}.$

Le générateur \mathcal{L} est défini pour un ensemble de fonctions $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ qui est son « domaine ».

Il y a équivalence entre la donnée du semi-groupe $(P_t)_{t\geq 0}$ et son générateur \mathcal{L} + domaine $\mathcal{D}(\mathcal{L})$ puisque quasiment par définition :

$$\partial_t P_t f = \mathcal{L} P_t f = P_t \mathcal{L} f.$$

2.1.2 Parallèle avec les chaines de Markov

Lien fonctionnel Les transitions dynamiques de chaine de Markov sont données dans une matrice Q (éventuellement infinie si E l'est). Le lien avec les semi-groupes de Markov est précisé ci-après. On considère

$$Q_t = e^{t(Q-Id)} = e^{-t} \sum_{n \geqslant 0} \frac{t^n}{n!} Q^n$$

Si f est une fonction bornée de E, $Q_t f$ est bien définie. Par ailleurs, il est assez clair que

$$Q_{t+s} = Q_t Q_s = Q_s Q_t.$$

De plus, si Q est irréductible, alors pour tout t > 0, $Q_t(x, y) > 0$ pour tout couple (x, y) de E.

Les probabilités invariantes de Q_t sont identiques à celles de Q et si Q est irréductible, il n'y a qu'une seule probabilité invariante pour Q_t .

Enfin, si L = Q - Id, alors on a immédiatement que

$$\lim_{t \to 0} \frac{Q_t f - f}{t} = Lf.$$

Lien trajectoriel La relation trajectorielle entre le semi-groupe défini dans Q_t et la chaine de Markov est finalement assez simple. Introduisons une suite i.i.d. d'inter-temps de sauts exponentiels de paramètre 1 et notons ces variables aléatoires $(\xi_j)_{j\geq 0}$. Le k-ième temps de saut est alors

$$T_k = \sum_{j=1}^k \xi_j.$$

À chaque instant de saut, le processus $(X_t)_{t\geq 0}$ décide de transiter vers y avec la probabilité de transition $Q(X_{T_k}, dy)$. Le nombre de sauts avant t étant distribué comme une loi de Poisson N_t de paramètre 1, on obtient alors que

$$\mathbb{P}(X_t = y | X_0 = x) dy = \sum_{t=1}^{+\infty} \mathbb{P}(X_t = y | X_0 = x \& N_t = k) \mathbb{P}(N_t = k) dy = \sum_{t=1}^{+\infty} e^{-t} \frac{t^k}{k!} Q^k(x, y) dy = Q_t(x, dy).$$

Ainsi, X_t correspond à une marche aléatoire dont les instants de saut sont aléatoires avec une structure poissonnienne précise.

Forme de Dirichlet Dans le paragraphe sur les chaînes de Markov, nous avons vu le rôle fondamental joué par les formes de Dirichlet pour la transition Q. Ce rôle sera tout aussi important pour les processus.

Définition 2.1.4 (Forme de Dirichlet, Opérateur carré du champ) Étant donné un générateur infinitésimal \mathcal{L} associé au semi-groupe $(P_t)_{t\geqslant 0}$, on définit le carré du champ

$$\Gamma(f,g) = \frac{1}{2} \left[\mathcal{L}(fg) - f\mathcal{L}(g) - g\mathcal{L}(f) \right].$$

Enfin, la forme de Dirichlet dans $L^2(\pi)$ est donnée par

$$\mathcal{E}(f,g) = \int \Gamma(f,g)d\pi.$$

Définition 2.1.5 (Symétrie) Le semi-groupe sera dit symétrique si on a dans $L^2(\pi)$ la propriété d'adjoint : $\mathcal{L} = \mathcal{L}^*$. Ceci est parfaitement équivalent à

$$\langle P_t f, g \rangle_{\pi} = \langle f, P_t g \rangle_{\pi}.$$

Équation d'équilibre On a vu que la distribution d'intérêt π est invariante pour le semi-groupe si

$$\forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{L}) \quad \forall t \geqslant 0 \qquad \pi(P_t f) = \pi(f).$$

En dérivant par rapport au temps, on obtient alors que

$$\frac{\partial \int_E (P_t f)(x) d\pi(x)}{\partial t} = 0.$$

En permuttant (sauvagement) intégrale et dérivation, on obtient que

$$\forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$$

$$\int_{E} \mathcal{L}f d\pi(x) = 0.$$

Cette dernière équation permettra en général d'identifier la mesure stationnaire en utilisant \mathcal{L}^* , l'adjoint de \mathcal{L} pour la mesure de Lebesgue :

$$\mathcal{L}^*\pi = 0.$$

2.1.3 Diffusion de Langevin-Kolmogorov

Un cas très fréquent de dynamique markovienne consiste à regarder les processus donnés comme solution d'équations différentielles stochastiques avec drift et bruit gaussien. En toute généralité, ces équations sont notées

$$\forall t \geqslant 0 \qquad dX_t = b(X_t)dt + dB_t, X_0 = x. \tag{2.1}$$

Nous ne discuterons pas ici d'éléments théoriques sur la construction de solutions faibles ou fortes de telles équations. Remarquons juste que la formule d'Ito donne pour toute fonction f assez régulière :

$$f(X_t) = f(x_0) + \int_0^t \langle b(X_s), \nabla f(X_s) \rangle ds + \frac{1}{2} \int_0^t \Delta f(X_s) ds + M_t,$$

où (M_t) est une martingale adaptée. Ainsi, par définition on a

$$P_t f(x) = \mathbb{E}[f(X_t)|X_0 = x] = \mathbb{E}f(X_t^x) = \mathbb{E}_x f(X_t) = f(x) + \int_0^t \mathbb{E}\langle b(X_s), \nabla f(X_s) \rangle ds + \frac{1}{2} \int_0^t \Delta f(X_s) ds.$$

Soit finalement l'expression du générateur infinitésimal :

$$\mathcal{L}f(x) = \langle \nabla f(x), b(x) \rangle + \frac{1}{2} \Delta f(x).$$

Nous reviendrons en détail sur ce processus de diffusion drifté (2.1).

2.2 Existence et unicité des mesures stationnaires

Contrairement à la situation où E est dénombrable (et encore moins fini), l'existence de mesure invariante est loin d'être une étape triviale pour les évolutions basées sur des semi-groupes à valeurs dans \mathbb{R} . Une excellente référence pour ce qui suit est sans doute l'ouvrage

[K12] R. Khasminskii Stochastic stability of Differential Equations, Second Edition, Stochastic Modelling and Applied Porbability, Springer.

Ce livre traite principalement du cas des diffusions pour les équations différentielles stochastiques mais tout ce qui y est raconté peut avoir un formalisme type semi-groupe très simple.

2.2.1 Non explosion

La propriété de non-explosion en temps fini est le B-A-BA attendu pour des systèmes dynamiques qui ont vocation à se stabiliser en temps grand. La plupart du temps, lorsque E est un \mathbb{R} espace vectoriel, il convient de trouver une fonction de **Lyapunov** permettant de controler les trajectoires du système dynamique.

Proposition 2.2.1 S'il existe $\psi : E \mapsto \mathbb{R}$ deux fois dérivable positive telle que $\lim_{|x| \to +\infty} \psi(x) = +\infty$ et telle qu'il existe une constante ψ positive vérifiant

$$\mathcal{L}\psi \leqslant K\psi$$
,

alors

$$\forall x \in E$$
 $\mathbb{P}_x[\tau < +\infty] = 0.$

<u>Preuve</u>: On définit $\tau_N = \inf\{t \ge 0 \mid \psi(X_t) > N\}$. Bien sûr, on a $\tau > \tau_N$ car la ligne de niveau $\psi \le N$ est compacte. On applique alors la formule d'Ito:

$$\mathbb{E}_{x}\psi(X_{t\wedge\tau_{N}}) = \psi(x) + \mathbb{E}_{x} \int_{0}^{t\wedge\tau_{N}} \mathcal{L}\psi(X_{s})ds$$

$$\leq \psi(x) + K\mathbb{E}_{x} \int_{0}^{t\wedge\tau_{N}} \psi(X_{s})ds$$

$$\leq \psi(x) + K\mathbb{E}_{x} \int_{0}^{t} \psi(X_{s\wedge\tau_{N}})ds$$

Le lemme de Gronwall permet alors de conclure que

$$\mathbb{E}_x \psi(X_{t \wedge \tau_N}) \leqslant \frac{\psi(x) e^{Kt}}{K}.$$

Par ailleurs, on a

$$N\mathbb{P}_x[\tau_N < t] = \mathbb{E}_x[\psi(X_{t \wedge \tau_N} 1_{\tau_N \leqslant t}] \leqslant \mathbb{E}_x[\psi(X_{t \wedge \tau_N}].$$

En fin de compte, on a

$$\mathbb{P}_x[\tau_N < t] \leqslant \frac{\psi(x)e^{Kt}}{KN} \longrightarrow 0 \quad \text{lorsque} \quad N \longrightarrow +\infty.$$

On en déduit alors immédiatement que $\mathbb{P}_x[\tau < t] = 0$, pour tout t fini.

Lorsqu'on considère les trajectoires obtenues par le biais d'EDS, il suffit d'avoir $\langle x, b(x) \rangle = \mathcal{O}(|x|^2)$ par exemple pour que le choix $\psi(x) = |x|^2$ soit suffisant pour appliquer le résultat de non explosion précédent. Bien sûr, une situation où $\langle x, b(x) \rangle$ devient négatif lorsque $|x| \longrightarrow +\infty$ permet d'être dans une situation encore plus favorable.

Exemple 2.2.1 (Système Linéaire) Assurément, le système stochastique le plus simple est celui qui correspond à une équation différentielle du genre

$$dX_t = A(t)X_tdt + dB_t.$$

Bien sûr, si A est une fonction bornée, l'existence en temps fini est "gratuite" puisque la condition Lipschitz classique dans les EDS est satisfaite. Cependant, cette situation où A est bornée est souvent mise en défaut dans des problèmes concrets et on consultera avec profit [K12], exemple 1.1, p. 10 pour obtenir une version édulcorée d'hypothèses garantissant la non explosion en temps fini.

Exemple 2.2.2 (Semi-groupe d'Ornstein-Uhlenbeck) Le second système classique est un cas particulier du précédent :

$$dX_t = -\lambda X_t dt + dB_t, \qquad \lambda > 0.$$

C'est un système avec drift linéaire vers l'origine, d'intensité λ . On vérifiera la propriété de non explosion avec une fonction judicieusement choisie (un polynôme en x par exemple). Par ailleurs, on identifiera la mesure invariante à l'aide du critère de la section précédente au travers du calcul de l'adjoint du générateur du semi-groupe d'Ornstein-Uhlenbeck.

Enfin, il est évidemment possible d'écrire que X_t est en réalité égal à :

$$X_t = X_0 e^{-\lambda t} + \int_0^t e^{\lambda(s-t)} dB_s,$$

Identifier à nouveau la mesure invariante de X_t ainsi que sa "vitesse" de convergence.

Exemple 2.2.3 (Semi-groupe d'Ornstein-Uhlenbeck) Qu'en est-il pour l'EDS suivante

$$dX_t = -\nabla U(X_t)dt + dB_t.$$

Exemple 2.2.4 (Oscillateur de Van der Pol) On considère le système différentiel

$$dX_t = V_t dt$$
 et $dV_t = -V_t f(X_t) - g(X_t) + dB_t$

On considère le cas où $f(x) = x^2 - 1$ et g(x) = x. Alors, la fonction

$$V(x,y) = \sqrt{x^2 + y^2},$$

est une fonctino de Lyapunov pour le système et garantit la non explosion en temps fini.

2.2.2 Unicité de la mesure stationnaire

Ce résultat d'unicité est à rechercher dans le contexte de l'irréductibilité de la transition définie dans $(P_t)_{t\geq 0}$. En effet, pour les chaînes de Markov, c'est déjà l'irréductibilité de la transition Q qui permet de donner des résultats d'unicité des distributions stationnaires (voir le premier théorème du cours).

Nous allons volontairement nous placer dans un cadre simplifié où le générateur infinitésimal \mathcal{L} est elliptique et $E = \mathbb{R}^d$ et nous admettons que le semi-groupe P_t agit sur la mesure initiale μ en lui conférant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur E. Cette densité au temps t est notée $p_t(x,y)$. Ce genre de résultat un petit peu anecdotique par rapport à ce cours est par exemple vrai dès que le système dynamique est elliptique (covariance inversible devant le mouvement brownien dans une e.d.s.) ou hypo-elliptique (conditions de Hormandër satisfaites localement).

La formule d'Ito s'écrit pour toute fonction $f \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$:

$$\mathbb{E}_x [f(X_t)] = \int_0^t \mathbb{E}_x \mathcal{L} f(X_s) ds.$$

Par ailleurs, on a

$$\mathbb{E}_x [f(X_t)] = \int_E p_t(x, y) f(y) dy \quad \text{et} \quad \mathbb{E}_x \mathcal{L} f(X_s) = \int_E \mathcal{L} f(y) p_t(x, y) dy.$$

En différentiant par rapport au temps et en notant \mathcal{L}^* l'adjoint de \mathcal{L} par rapport à la mesure de Lebesgue, on obtient que la mesure au temps t vérifie l'e.d.p. :

$$\partial_t p_t(x,y) = \mathcal{L}^* p_t(x,y).$$

Cette équation est <u>l'équation backward de Kolmogorov</u> (ou de Fokker-Planck). L^* étant elliptique, on en déduit alors que $p_t(.,.)$ est une fonction \mathcal{C}^{∞} en tout temps t > 0. Par ailleurs, étant donnée une mesure invariante π (on confond ici mesure et densité par rapport à la mesure de Lebesgue) pour \mathcal{L} , elle est également strictement positive p.s. puisqu'on peut vérifier la relation

$$\pi(z) = \int_{E} p_t(x, z) \pi(x) dx.$$

Nous venons d'établir la proposition :

Proposition 2.2.2 Si \mathcal{L} est elliptique ou hypo-elliptique, et si μ est la loi initiale de X_0 , alors la mesure $P_t\mu$ est à densité par rapport à la mesure de Lebesgue, de densité p_t qui est $\mathcal{C}^{\infty}(E)$. Par ailleurs, si on initialise en $X_0 = x$, la densité $(x, y) \mapsto p_t(x, y)$ est $\mathcal{C}^{\infty}(E \times E)$. Cette densité vérifie l'équation backward de Kolmogorov :

$$\partial p_t = \mathcal{L}^* p_t.$$

Par ailleurs, si on a une dynamique $dx_t = b(x_t)dt + dB_t$, alors on a

$$\forall t > 0 \quad \forall (x, y) \in E^2 \qquad p_t(x, y) > 0.$$

Nous établissons maintenant un résultat d'unicité de mesure invariante lorsque le semigroupe est irréductible.

Lemme 2.2.1 Si une mesure π vérifie $P_t\pi \leqslant \pi$ pour tout t > 0, alors celle-ci est invariante.

<u>Preuve</u>: La démonstration est très simple : on prend un ensemble mesurable A et on remarque que $(P_t\pi)(A) \leq \pi(A)$ et $(P_t\pi)(A^c) \leq \pi(A^c)$. Cela implique bien entendu l'égalité des probabilités et donc que π est invariante.

On passe maintenant au résultat d'unicité de mesure invariante qui est vrai dans des situations un peu plus générale que ce qui est énoncé ici.

Théorème 2.2.1 (Théorème d'unicité de Doob) Si le semi-groupe est elliptique et irréductible, alors il existe au plus une unique mesure invariante.

<u>Preuve</u>: On considère deux distributions invariantes π_1 et π_2 pour le semi-groupe. On sait que ces deux distributions sont absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue. On identifie ces deux mesures avec leurs densités (qui sont strictement positives sur E) et on écrit

$$\pi_1 = h\pi_2$$
.

On suppose qu'il existe un x de E tel que $h(x) = a \ge 1$. On considère $\nu_a = (h \land (1+a)/2)\pi_2$ et cette distribution satisfait

$$P_t \nu_a = P_t (h \wedge a) \pi_2 \leqslant P_t h \pi_2 = h \pi_2.$$

De même,

$$P_t \nu_a \leqslant P_t h \pi_2 = P_t \pi_1 = \pi_1 = h \pi_2.$$

Du coup, on a bien que

$$\forall t > 0$$
 $P_t \nu_a \leqslant \nu_a$

et ν_a est une mesure invariante d'après la proposition précédente. Ainsi, le semi-groupe laisse invariante $\mu_a = (1+a)/2\pi_1 - \nu_a$ mais $\mu_a = \left[\frac{1+a}{2} - h\right]_+ \pi_1$. Cette mesure peut être renormalisée en mesure de probabilité mais elle contient également un point x pour lequel $\mu_a(x) = 0$. C'est impossible puisque $P_t\mu_a = \mu_a$ qui implique la stricte positivité partout. On obtient alors que h est identiquement égale à 1. Cela conclut la preuve de l'unicité. \Box

2.2.3 Existence de mesures stationnaire

L'existence de mesure stationnaire est issue d'arguments qui seront également valables pour les chaines de Markov à espace d'états plus que dénombrable. L'idée principale pour établir un tel résultat revient à montrer que le processus markovien passe la plupart de son temps dans un espace borné puis il convient d'utiliser un argument de type compacité pour prouver l'existence d'une telle mesure invariante.

Il y a alors deux façons de procéder :

 la première technique consiste à démontrer que les mesures d'occupation aléatoires d'une trajectoire, formées par

$$\mu_n = \frac{1}{t_n} \int_0^{t_n} \delta_{X_s} ds$$

forment un ensemble tendu de mesures, ce qui permet d'extraire une sous-suite convergente puis en déduire que la limite est stable par P_t . Ce genre d'arguments est employé par exemple dans le livre

[EK86] S. ETHIER ET T. KURTZ Markov processes, characterisation and convergence Wiley, New-York, 1986.

– La seconde méthode consiste à exhiber une mesure qui est invariante pour le processus markovien. La construction fait appel à la définition d'une chaîne de squelette pour le processus $(X_t)_{t\geq 0}$ et est utilisée dans

[K12] R. Khasminskii Stochastic stability of Differential Equations, Second Edition, Stochastic Modelling and Applied Porbability, Springer.

Comme cette construction est également fondamentale pour le problème des grandes déviations de mesure invariante (chapitre 4) et le recuit simulé, nous aborderons cette construction là.

Quelle que soit la méthode employée, il s'agit en général de trouver une façon d'estimer les temps de retour dans les espaces compacts. Ceci est en général facile dès lors qu'on a trouvé une « bonne » fonction de Lyapunov. À noter que ces fonctions de Lyapunov étaient déjà fondamentales pour prouver la non explosion du processus en temps fini. Nous introduisons l'hypothèse de récurrence :

Hypothèse 1 (H_R) : Il existe un ensemble U ouvert borné de E de bord Γ lisse tel que

- 1. $(\mathbf{H_{R1}})$ Dans U, le processus est elliptique, par exemple la matrice de diffusion est non dégénérée de déterminant minoré.
- 2. $(\mathbf{H_{R2}})$ Pour tout compact K de $E \setminus U$, le temps moyen τ_U issu de $x \in K$ pour rentrer dans U est uniformément borné :

$$\sup_{x \in K} \mathbb{E}_x \tau_U \leqslant T_K < +\infty.$$

Nous supposons dans un premier temps que les conditions $(\mathbf{H_R})$ sont satisfaites et construisons un ouvert U_1 de frontière Γ_1 vérifiant $(\mathbf{H_R})$. Dans cet ouvert U_1 , on considère alors un ouvert U de bord régulier Γ tel que $U \cup \Gamma \subset U_1$. Nous renvoyons à la figure 2.1 pour une réalisation imagée.

On définit alors

$$\tau_0 = 0$$
 et $\tau_1' = \inf\{t \geqslant 0 \mid X_t \in \Gamma_1\},$

$$X(\tau_1')$$
 $X(\tau_1)$ $X(\tau_2')$

$$U \qquad \Gamma$$

$$X(\tau_2)$$

$$U_1$$

$$\Gamma_1$$

FIGURE 2.1 – Construction de la chaine squelette.

puis par récurrence :

$$\tau_n = \inf\{t \geqslant \tau'_n \mid X_t \in \Gamma\} \quad \text{et} \quad \tau'_{n+1} = \inf\{t \geqslant \tau_n \mid X_t \in \Gamma_1\}.$$

Par hypothèse, on sait que le processus est récurrent irréductible sur U_1 puisque \mathcal{L} y est elliptique par $(\mathbf{H_{R1}})$ et toute excursion hors de U_1 y revient irrémédiablement par $(\mathbf{H_{R2}})$. Ainsi, les temps τ_n et τ'_n sont finis presque sûrement.

Définition 2.2.1 (Chaîne squelette) On définit la chaîne squelette par

$$\tilde{X}_i := X(\tau_i), \quad \forall i \geqslant 0.$$

La semi-groupe de transition pour \tilde{X} sera noté \tilde{P} :

$$\mathbb{E}_x f(\tilde{X}_1) = \int_{\Gamma_1} \tilde{P}(x, dy) f(y).$$

Par compacité de Γ_1 , on peut démontrer un résultat proche du théorème de Doeblin.

Proposition 2.2.3 La chaîne de Markov est irréductible et récurrente sur Γ_1 . Elle admet une unique mesure invariante $\tilde{\mu}$ portée par Γ_1 et il existe $k \in (0,1)$ tel qu'uniformément en $\gamma \in \Gamma_1$:

$$\left|\tilde{P}^n(x,\gamma) - \tilde{\mu}(\gamma)\right| \leqslant k^n.$$

Nous allons ensuite construire à partir de $\tilde{\mu}$ une mesure invariante pour le processus $(X_t)_{t\geqslant 0}$, sisi! On définit pour tout ensemble mesurable A le temps passé dans A par le processus avant le premier retour dans Γ_1 :

$$\pi(A) := \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_1} 1_{X_s \in A} ds.$$

On a alors le résultat fondamental :

Théorème 2.2.2 (Existence de mesure invariante) Sous les hypothèses $(\mathbf{H_R})$, le processus $(X_t)_{t\geq 0}$ possède π comme mesure invariante. De plus, cette mesure est de masse finie et peut être normalisée en probabilité invariante.

<u>Preuve</u>: On considère f définie sur E et

$$\pi(f) = \int_{\Gamma_1} f(y)\pi(dy) = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_1} f(X_u) du.$$

Fixons désormais un temps t quelconque, on a alors par la propriété de Markov que

$$\pi(P_t f) = \int_E \pi(dx) f(X_t^x) = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_1} f(X_{t+s}) ds.$$

et un changement de variable u = t + s montre que

$$\pi(P_t f) = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_t^{t+\tau_1} f(X_u) du$$

$$= \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_1} f(X_u) du + \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_{\tau_1}^{\tau_1+t} f(X_u) du$$

$$- \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^t f(X_u) du.$$

Pour le terme du milieu entre τ_1 et $\tau_1 + t$, on peut tout conditionner par rapport à \tilde{X}_1 et

$$\int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_{\tau_1}^{\tau_1 + t} f(X_u) du = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \underbrace{\mathbb{E}_{\tilde{X}_1} \int_0^t f(X_u) du}_{:=g(\tilde{X}_1)}. \tag{2.2}$$

Maintenant, on sait que $\tilde{\mu}$ est stationnaire pour \tilde{X} donc

$$\tilde{\mu}(g) = \tilde{\mu}(\tilde{P}g),$$

c'est à dire pour toute fonction ψ mesurable et bornée :

$$\int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx)\psi(x) = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \psi(\tilde{X}_1). \tag{2.3}$$

En utilisant l'invariance donnée dans (2.3) dans (2.2) avec $\psi = g$, on obtient

$$\int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_{\tau_1}^{\tau_1 + t} f(X_u) du = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) g(x) = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^t f(X_u) du$$

En fin de compte, en reprenant l'expression finale obtenue pour $\pi(P_t f)$ et en supprimant ce qui doit l'être, on trouve

$$\pi(P_t f) = \int_E \mathbb{E}_x f(X_t) \pi(dx) = \int_{\Gamma_1} \tilde{\mu}(dx) \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_1} f(X_u) du = \int_E \pi(dx) f(x) = \pi(f).$$

La mesure π est donc invariante.

Pour obtenir le caractère fini de la mesure, il suffit de calculer $\pi(E)$. Mais on sait d'après $(\mathbf{H_{R2}})$ que

$$\sup_{x \in \Gamma_1} \mathbb{E}_x \tau_1 \leqslant T_{U_1} < +\infty.$$

La mesure est donc finie.

2.2.4 Controler les temps de retour dans les compacts

Où nous en sommes Nous donnons dans cette partie une méthode exploitant totalement l'outil « fonction de Lyapunov » pour obtenir que l'hypothèse $(\mathbf{H}_{\mathbf{R}})$ soit satisfaite.

Le premier volet de $(\mathbf{H_{R1}})$ est une condition d'irréductibilité, nous avons vu que cela mettait en jeu des propriétés de régularité du semi-groupe (ellipticité de \mathcal{L}), et de controlabilité trajectorielle (on peut passer d'un point quelconque de E à un autre quelconque avec probabilité strictement positive). Aussi, nous ne reviendons pas sur $(\mathbf{H_{R1}})$. Attardons nous plutôt sur la compactification réclamée par $(\mathbf{H_{R2}})$.

La condition $\mathcal{L}V \leq \beta - \alpha V$ L'idée est de trouver une fonction V minorée (en fait positive la plupart du temps), dite fonction de Lyapunov possédant la propriété $V(x) \mapsto +\infty$ lorsque $|x| \mapsto +\infty$ telle que l'évolution de $V(X_t)$ a plutôt tendance à être bornée.

Si pour une telle fonction V pour laquelle nous avons l'existence de $\alpha>0$ et $\beta>0$ tels que

$$\mathcal{L}V \leq \beta - \alpha$$
.

Fixons un compact K quelconque de E, comme V est coercive, on choisit et un ouvert U tel que

$$\forall x \notin U \qquad \alpha V(x) \geqslant 2\beta. \tag{2.4}$$

On définit τ_U le temps de rentrée dans U et $\tau_U^n = \tau_U \wedge n$ qui est un temps d'arrêt borné. La formule de Dynkin (Ito appliquée à un temps d'arrêt) montre que

$$\forall x \in K$$
 $\mathbb{E}_x V(X_{\tau_U^n}) = V(x) + \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_U^n} \mathcal{L}V(X_s) ds$

Avant τ_U^n , le processus n'est pas dans U donc on peut appliquer (2.4) pour obtenir que

$$\forall x \in K$$
 $\mathbb{E}_x V(X_{\tau_U^n}) + \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_U^n} -\mathcal{L}V(X_s) ds = V(x),$

d'où

$$\forall x \in K$$
 $V(x) \geqslant \beta \mathbb{E}_x \int_0^{\tau_U^n} 1 ds = \beta \mathbb{E}_x \tau_U^n.$

Nous obtenons alors par convergence monotone la borne :

$$\sup_{x \in K} \mathbb{E}_x \tau_U \leqslant \frac{\sup_{x \in K} V(x)}{\beta}.$$
 (2.5)

Nous avons donc établi le théorème

Théorème 2.2.3 (Existence de mesure invariante) S'il existe V fonction de Lyapunov (vérifiant min V > 0, coercive) telle que $\mathcal{L}V \leq \beta - \alpha V$ pour $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^2_+$, alors il existe U un ouvert tel que pour tout compact K:

$$\sup_{x \in K} \mathbb{E}_x \tau_U \leqslant C_K.$$

En particulier, si \mathcal{L} est elliptique sur U il existe une mesure invariante pour $(X_t)_{t\geqslant 0}$.

2.3 Vitesse de convergence

Tout comme pour les chaines de Markov, on peut exhiber (au moins) deux méthodes de preuve pour trouver des vitesses de convergence pour les procesuss de Markov. La première méthode appartient aux techniques spectrales tandis que la seconde est obtenue par couplage utilisant encore une fois les fonctions de Lyapunov. Nous donnerons rapidement des exemples.

2.3.1 Convergence par inégalité fonctionnelle

Une documentation archi-complète sur ce très vaste domaine se trouve dans [ABC+] C.Ané, S.Blachère, D.Chafaï, P.Fougères, I.Gentil, F.Malrieu, C.Roberto, G.Scheffer Sur les inégalités de Sobolev logarithmiques, Société Mathématique de France, 2000

Vitesse exponentielle à l'équilibre Nous commençons par établir un résultat classique lorsqu'on sait démontrer une inégalité de Poincaré sur la mesure stationaire.

Définition 2.3.1 (Inégalité de Poincaré) Soit π la mesure stationnaire associée au semi-groupe de générateur \mathcal{L} . La mesure satisfait une inégalité de trou spectral (ou de Poincaré) s'il existe une constante C_P telle que

$$\forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$$
 $Var_{\pi}(f) = \int_{E} [f - \pi(f)]^{2} d\pi \leqslant C_{P} \mathcal{E}(f, f).$

Supposons l'opérateur \mathcal{L} auto-adjoint dans $L^2(\pi)$ et soit λ une valeur propre de $-\mathcal{L}$, de vecteur propre associé f tel que $\pi(f) = 0$. Alors :

$$\int_{E} f^{2} d\pi = \frac{1}{\lambda} \int_{E} -\mathcal{L}(f) f d\pi.$$

Par ailleurs, nous avons $2\Gamma(f, f) = \mathcal{L}(f^2) - 2f\mathcal{L}(f)$ donc

$$\int_{E} -\mathcal{L}(f) f d\pi = \int_{E} \Gamma(f, f) d\pi - \frac{1}{2} \int_{E} \mathcal{L}(f^{2}) d\pi$$

$$= \mathcal{E}(f, f) - \langle \mathcal{L}(f^{2}), 1 \rangle_{\pi}$$

$$= \mathcal{E}(f, f) - \langle f^{2}, \mathcal{L}(1) \rangle_{\pi}$$

$$= \mathcal{E}(f, f),$$

car $\mathcal{L}(1) = 0$. On peut aussi voir cette dernière annulation en utilisant l'adjoint de \mathcal{L} pour la mesure de Lebesgue pour lequel $\mathcal{L}^*(\pi) = 0$ par stationnarité. Nous venons donc d'établir que

$$Var_{\pi}(f) = \frac{1}{\lambda}\mathcal{E}(f, f).$$

Par conséquent, si π , \mathcal{L} vérifient une inégalité de Poincaré de constante C_P , on a alors

$$\frac{1}{\lambda} \leqslant C_P$$
.

Cela signifie donc que les valeurs propres de $-\mathcal{L}$ satisfont la propriété de « trou spectral » :

$$Sp(-\mathcal{L}) \subset \{0\} \cup \left[\frac{1}{C_p}, +\infty\right].$$

Nous pouvons désormais démontrer le théorème de convergence exponentielle du semigroupe vers π .

Théorème 2.3.1 (Ergodicité par trou spectral, cas symétrique) Soit P_t un semigroupe de générateur \mathcal{L} et mesure invariante π , tels que \mathcal{L} est symétrique dans $L^2(\pi)$. Il y a équivalence entre les deux propositions suivantes.

- i) \mathcal{L} satisfait une inégalité de Poincaré de constante C_P .
- ii) Il y a convergence exponentielle:

$$\forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{L}) \qquad Var_{\pi}(P_t f) \leq e^{-2t/C_p} Var_{\pi}(f).$$

<u>Preuve</u> : On démontre tout d'abord que $i) \Rightarrow ii$). On suppose que $\pi(f) = 0$ sans perte de généralité. On définit

$$\phi(t) := \int_{E} [P_t f]^2 d\pi = Var_{\pi}(P_t f).$$

On a alors

$$\phi'(t) = \int_{E} 2\mathcal{L}(P_{t}f)(P_{t}f)d\pi$$
$$= -2\mathcal{E}(P_{t}f, P_{t}f).$$

L'inégalité de Poincaré implique alors que

$$\phi'(t) \leqslant -\frac{2}{C_P}\phi(t),$$

et on conclut en appliquant le lemme de Gronwall:

$$Var_{\pi}(P_t f) \leqslant e^{-\frac{2}{C_P}t} Var_{\pi}(f).$$

Réciproquement, montrons que $ii) \Rightarrow i$) et supposons que l'on ait l'ergodicité exponentielle. Pour t=0, il est facile de voir que les deux côtés de l'inégalité sont égaux. Ainsi, la dérivée en t=0 du terme de droite est supérieure à la dérivée en t=0 du terme de gauche :

$$\phi'(0) \leqslant -\frac{2}{C_P} Var_{\pi}(f).$$

Mais un calcul rapide montre que

$$\phi'(0) = -2\mathcal{E}(f, f).$$

Cela aboutit directement à l'inégalité de Poincaré :

$$Var_{\pi}(f) \leqslant C_{P}\mathcal{E}(f,f)$$

Le théorème est donc démontré.

Tensorisation Enfin, il y a une façon de déduire des inégalités de Poincaré si on arrive à décomposer le générateur \mathcal{L} . Cela peut se faire par le biais de la propriété de « tensorisation ». Considérons \mathcal{L}_1 et \mathcal{L}_2 deux générateurs infinitésimaux de semi-groupe $(P_t^1)_{t\geqslant 0}$ sur (E_1, π_1) et $(P_t^2)_{t\geqslant 0}$ sur (E_2, π_2) . On étudie le semi-groupe sur l'espace produit $E_1 \times E_2$ pour la mesure $\pi = \pi_1 \otimes \pi_2$ donné par

$$P_t((x_1, x_2), (dx_1, dx_2)) = P_t^1(x_1, dx_1)P_t^2(x_2, dx_2).$$

On montre facilement (exercice...) que le générateur est alors

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2.$$

Cette notation doit être comprise ainsi : pour une fonction f de deux variables (x_1, x_2) on calcule \mathcal{L} en appliquant \mathcal{L}_1 (resp. \mathcal{L}_2) à x_2 (resp. x_1) fixée et on additionne les résultats. L'opérateur carré du champ Γ est donc donné par $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$. On a alors la tensorisation de la variance :

Proposition 2.3.1

$$\forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$$
 $Var_{\pi}(f) \leq \int_{E} [Var_{\pi_{1}}(f) + Var_{\pi_{2}}(f)]d\pi$

On étudie la différence des deux termes :

$$\int_{E} \left[Var_{\pi_{1}}(f) + Var_{\pi_{2}}(f) \right] - Var_{\pi}(f) = \int_{E} \left(\int_{E_{1}} \left[f(., x_{2}) - \pi_{1}(f(., x_{2}))^{2} d\pi_{1} \right) d\pi \right) d\pi + \int_{E} \left(\int_{E_{2}} \left[f(x_{1}, .) - \pi_{2}(f(x_{1}, .))^{2} d\pi_{2} \right) d\pi \right) d\pi - \int_{E} \left[f(., .) - \pi(f) \right]^{2} d\pi.$$

Le théorème de Tonnelli permet alors d'écrire que

$$\int_{E} \left[Var_{\pi_1}(f) + Var_{\pi_2}(f) \right] - Var_{\pi}(f) = \int_{E} f^2 d\pi - \int_{E} \left[\int_{E} f d\pi_1 \right]^2 d\pi - \int_{E} \left[\int_{E} f d\pi_2 \right]^2 d\pi + \left[\int_{E} f d\pi \right]^2.$$

On vérifiera alors que le dernier terme se re-écrit en fait

$$\int (f - \pi_1(f) - \pi_2(f) + \pi(f))^2 d\pi.$$

Ce dernier terme est bien sûr toujours positif, ce qui démontre la proposition.

On déduit immédiatement de cette tensorisation l'inégalité de Poincaré pour le semigroupe $(P_t)_{t\geq 0}$ décrivant la dynamique « produit ».

Théorème 2.3.2 (Tensorisation de l'inégalité de Poincaré) Supposons que les mesures π_1 et π_2 vérifient une inégalité de Poincaré de constante C_1 (resp. C_2) pour l'opérateur carré du champ Γ_1 (resp. Γ_2) associé au générateur \mathcal{L}_1 (resp. \mathcal{L}_2). Alors il en est de même pour $\pi = \pi_1 \otimes \pi_2$ et $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$, avec la constante $C_P = max(C_1, C_2)$:

$$\forall f \in \mathcal{D}(\mathcal{L}) \qquad Var_{\pi}(f) \leqslant max(C_1, C_2) \int \Gamma(f, f) d\pi.$$

Défaut (?) Bien entendu, la structure spectrale est fondamentale dans toute cette partie, en particulier le caractère symétrique de \mathcal{L} dans $L^2(\pi)$ est incontournable. Même si ce cas symétrique se rencontre fréquemment, le monde est parfois mal fait et des exemples très intéressants mettent en jeu des dynamiques où \mathcal{L} n'est pas auto-adjoint. Dans ce cas, il est possible d'attaquer les problèmes de stabilisation du système avec d'autres outils, plus trajectoriels. Une façon de procéder est décrite dans le paragraphe suivant.

Par ailleurs, les résultats fournis par une analyse spectrale sont parfois assez difficiles à interpréter d'un point de vue trajectoriel. Ils sont en revanche remarquablement précis.

2.3.2 Convergence par méthode de couplage

L'idée de couplage pour les processus est finalement assez proche de ce qui a été utilisé pour le théorème de Doeblin. On suppose l'existence d'un compact C de mesure de Lebesgue strictement positive que le processus $(X_t)_{t\geqslant 0}$ rencontre avec des temps de retour assez fréquents.

Définition 2.3.2 (Petite set) Par ailleurs, on suppose que sur ce même compact C, le semi-groupe est minoré « à la Doeblin » :

$$\exists T > 0 \quad \forall x \in C \qquad P_T(x,.) \geqslant \epsilon Q(.).$$

Ici, Q est une probabilité sur E, $\epsilon > 0$ et C est alors appelé un (T, ϵ) petite set.

Moyennant cette définition, on peut énoncer le résultat suivant qui donne une version qualitative de la contraction autour de π pour le semi-groupe P_t . Pour ce faire, fixons nous une distribution de probabilités quelconque μ pour X_0 et on considère le processus couplé (X_t, Y_t) de dynamique $P_t \otimes P_t$ où chaque coordonnée suit le semi-groupe de façon indépendante. On suppose par ailleurs que Y_t est initialisé sur la mesure stationnaire π , de sorte que

$$\forall t \geqslant 0$$
 $\mathcal{L}(Y_t) = \pi$.

Théorème 2.3.3 (Roberts & Rosenthal, 1996) Étant donné un semi-groupe P_t d'unique distribution invariante π et C un (T, ϵ) -petite set. S'il existe $\delta > 0$ et une fonction $h: E \times E \mapsto \mathbb{R}$ telle que $\min h \geqslant 1$ et vérifiant

$$\forall (x,y) \notin C \times C \qquad \mathbb{E}_{x,y} e^{\delta \tau_{C \times C}} \leq h(x,y)$$
 (2.6)

où $\tau_{C\times C}$ est le temps d'atteinte de $C\times C$ par le processus (X_t,Y_t) . Si on définit

$$A := \sup_{(x,y)\in C^2} \mathbb{E}_{x,y} h(X_T, Y_T),$$

alors pour tout t > 0 et $r \in (0, 1/T)$:

$$d_{VT}(P_t\mu, \pi) \le (1 - \epsilon)^{[rt]} + e^{-\delta(t-T)} A^{[rt]-1} \mathbb{E}_{\mu \otimes \pi} h(X_0, Y_0).$$

Ce résultat donne bien l'ergodicité à vitesse exponentielle de $P_t\mu$ vers π dès qu'il existe un moment exponentiel pour le temps de retour du couple (X_t, Y_t) initialisé en dehors de $C \times C$: r peut être choisi aussi petit que l'on veut (donc tel que $r \log A < \delta$ si nécessaire)

<u>Preuve</u>: Nous procédons à une construction explicite de trajectoires (X_t, Y_t) qui suivent la loi du semi-groupe.

On commence par définir $t_0 = \inf\{t \ge 0 \mid (X_t, Y_t) \in C^2\}$. Ce temps d'arrêt t_0 est fini p.s. par hypothèse. Puis, par récurrence :

$$t_n = \inf\{t \geqslant t_{n-1} + T \mid (X_t, Y_t) \in C^2\}.$$

Comme sur C, nous avons la minoration du semi-groupe $P_T(x,.) \ge \epsilon Q(.)$, on peut écrire l'égalité ultra-simple :

$$P_T(x,.) = \epsilon Q(.) + (1 - \epsilon) \frac{P_T(x,.) - \epsilon Q(.)}{1 - \epsilon}.$$

Ainsi, la transition $P_T(x,.)$ est un mélange de proportion $(\epsilon, 1-\epsilon)$ des transitions Q(.) et $\frac{P_T(x,.)-\epsilon Q(.)}{1-\epsilon}$. L'avantage d'une telle écriture est que Q ne dépend a priori pas du point x dans C

Au temps t_i , si les processus n'ont pas encore couplé (comprendre si X_t et Y_t ne sont pas encore égaux), on peut choisir de construire (X_{t_i+T}, Y_{t_i+T}) ainsi :

- Avec probabilité ϵ , on tire une simulation de Q(.) notée ξ_i et on choisit

$$X_{t_i+T} = Y_{t_i+T} = \xi_i.$$

Si on a sélectionné le couplage, alors on construit le bout de trajectoire manquant entre t_i et $t_i + T$ en utilisant les bonnes transitions, conditionnées à la valeur de X_{t_i} et X_{t_i+T} .

– Avec probabilité $1 - \epsilon$, on choisit

$$X_{t_{i}+T} \sim \frac{P_T(X_{t_i}, .) - \epsilon Q(.)}{1 - \epsilon}$$
 et $Y_{t_{i}+T} \sim \frac{P_T(Y_{t_i}, .) - \epsilon Q(.)}{1 - \epsilon}$

Dès que les processus ont couplé, on les laisse alors évoluer de manière indépendante, chacun ayant la loi π . Par ailleurs, par construction, chaque processus suit une dynamique guidée par le semi-groupe P_t .

Il ne reste plus qu'à utiliser l'inégalité de couplage (déjà écrite dans la partie chaîne de Markov) pour t^* le temps de couplage :

$$d_{VT}(P_t\mu,\pi) \leqslant \mathbb{P}(t^* > t),$$

puis majorer la queue de distribution du temps de couplage t^* .

De manière très simple, on définit $N_t = \max\{i \mid |t_i \leq t\}$ et on a pour tout $r \in (0, 1/T)$:

 $\{t^* > s\} = \{N_{s-T} < \lfloor rs \rfloor \& \text{chec des tentatives}\} \cup \{N_s > \lfloor rs \rfloor \& \text{chec des tentatives}\}.$

Puis, en passant aux probabilités :

$$\mathbb{P}(t^* > s) \leqslant (1 - \epsilon)^{\lfloor rs \rfloor} + \mathbb{P}(N_{s-T} < \lfloor rs \rfloor).$$

Le premier terme du majorant est dans la conclusion du théorème, il nous reste à faire apparaître dans le second terme du majorant la quantité recherchée.

On peut écrire : $D_1 = t_1$ et $D_i = t_i - t_{i-1}$ pour $i \ge 2$ de sorte que

$$\mathbb{P}(N_s < j) = \mathbb{P}(\sum_{i=1}^j D_i > s) \leqslant e^{-\delta s} \mathbb{E}\left[\prod_{i=1}^j e^{\delta D_i}\right] \leqslant e^{-\delta s} A^{j-1} \mathbb{E}_{\mu \otimes \pi} h(X_0, Y_0),$$

où l'on a utilisé l'hypothèse de majoration des moments exponentiels des temps de retour dans C. Cela achève la preuve du théorème.

Il nous reste enfin à voir comment obtenir la fameuse majoration des moments exponentiels des temps de rentrée dans C donnée par (2.6). Une telle condition se déduit en réalité assez aisément de la construction de fonctions de Lyapunov comme annoncé en début de section.

Proposition 2.3.2 (Majoration des moments des temps de retour dans un compact) Soit V minorée par 1 telle qu'il existe $\lambda > 0$ et Λ vérifiant

$$\forall x \in E$$
 $\mathcal{L}V(x) \leq -\lambda V(x) + \Lambda 1_C(x)$.

On pose $B := \inf_{C^c} V \text{ et } h(x,y) = \frac{1}{2} [V(x) + V(y)], \text{ on a alors}$

$$\forall (x,y) \notin C \times C$$
 $\mathbb{E}_{x,y}[e^{\delta \tau_{C \times C}}] \leq h(x,y),$

pour $\delta = \lambda - \frac{\Lambda}{2B}$ et dans ce cas $A \leqslant \Lambda/\delta + e^{-\delta T} \sup_C V$.

<u>Preuve</u>: On commence par calculer l'effet du générateur couplé (toujours noté \mathcal{L}) sur h pour constater que

$$\mathcal{L}h(x,y) \leqslant -\lambda h(x,y) + \frac{\Lambda}{2} [1 + 1_{C \times C}(x,y)].$$

Si $(x,y) \in C \times C$, on a :

$$\frac{\Lambda}{2} [1 + 1_{C \times C}(x, y)] = \Lambda,$$

sinon on a

$$\frac{\Lambda}{2}[1 + 1_{C \times C}(x, y)] = \frac{\Lambda}{2} \leqslant \frac{\Lambda}{2} \frac{h(x, y)}{B}.$$

Par conséquent, on a toujours l'inégalité:

$$\mathcal{L}h(x,y) \leq -\delta h(x,y) + \Lambda 1_{C\times C}(x,y).$$

La suite du raisonnement est alors très proche de ce qui a déjà été fait pour le contrôle des moyennes de temps de retour dans les compacts. On applique la formule de Dynkin : étant donnés $(x,y) \notin C \times C$:

$$\mathbb{E}_{x,y}[e^{\delta(t \wedge \tau_{C \times C})} h(X_t, Y_t)] \leqslant h(x, y)$$

puisqu'avant $\tau_{C\times C}$, on a $\Lambda 1_{C\times C}(x,y)(X_s,Y_s)=0$. Comme h est minorée par 1, nous obtenons donc

$$\mathbb{E}_{x,y}[e^{\delta \tau_{C \times C}}] \leqslant h(x,y).$$

Il ne reste plus qu'à calculer une majoration de A. On sait que

$$A = \sup_{(x,y)\in C\times C} \mathbb{E}_{x,y} h(X_T, Y_T).$$

Pour majorer A, il suffit d'appliquer la formule d'Ito à

$$\mathbb{E}_{x,y}h(X_t,Y_t) \leqslant h(x,y) + \mathbb{E}_{x,y} \int_0^t -\delta h(X_s,Y_s)ds + \Lambda t.$$

La borne obtenue dans la proposition provient alors du lemme de Gronwall.

2.4 Extensions

Les exemples suivants pourront être considérés lors d'une étude personnelle puis faire l'objet d'un petit travail de synthèse exposé en fin de cours. Les études proposées ici sont loin d'être aussi guidées que ce qui est proposé pour les chaines de Markov. Il est possible de présenter des éléments de simulation tout comme des études purement théoriques.

2.4.1 Processus d'Orstein-Ulhenbeck

Des références sont disponibles à peu près partout sur ce processus. Par exemple :

[ABC+] C.Ané, S.Blachère, D.Chafaï, P.Fougères, I.Gentil, F.Malrieu,

C.Bordero, C. Scherder Control de la facilitée de Cabalon les mithraires en Société Mathématic

C.Roberto, G.Scheffer Sur les inégalités de Sobolev logarithmiques, Société Mathématique de France, 2000.

[M82] P.-A. MEYER *Note sur les processus d'Ornstein-Uhlenbeck*, Séminaire de probabilités (Strasbourg), tome 16 (1982), p. 95-132.

Le processus d'Ornstein-Uhlenbeck (O.U.) est clairement l'exemple type de processus Markovien dirigé par un semi-groupe où tous les calculs sont explicitables. (X_t) est défini par

$$dX_t = \lambda(\mu - X_t)dt + \sigma dB_t.$$

Pour ce processus, on pourra:

- Étudier les propriétés du semi-groupe du processus O.U.
- Donner une expression exacte de la position X_t , tout comme de sa moyenne et variance.
- Donner des caractères trajectoriels du processus (non explosion, récurrence, etc).
- Étudier la onvergence par couplage à l'aide de fonctions de Lyapunov.
- Calculer le spectre et des vecteurs propres, puis étudier la convergence exponentielle.
 Quelle est l'influence de la dimension sur cette convergence?
- Simuler des trajectoires à l'aide d'un schéma d'Euler explicite.

On pourra également s'intéresser au processus brownien défini sur le tore $\mathbb{Z}/2\pi\mathbb{Z}$ ou bien défini par l'équation différentielles stochastique

$$dX_t = -sgn(X_t)dt + dB_t,$$

où sgn(x) désigne le signe de x. Son traitement est certainement plus délicat que pour le processus d'O.U. Pour cette équation, on consultera à profit :

[CGG07] P. CATTIAUX, I. GENTIL, A. GUILLIN. Weak logarithmic Sobolev inequalities and entropic convergence. Probab. Theory Related Fields, 139(3-4):563-603, 2007.

2.4.2 Inégalités de Sobolev Logarithmiques et décroissance de l'entropie

La référence incontournable sans nul doute reste toujours :

[ABC+] C.Ané, S.Blachère, D.Chafaï, P.Fougères, I.Gentil, F.Malrieu, C.Roberto, G.Scheffer Sur les inégalités de Sobolev logarithmiques, Société Mathématique de France, 2000

mais on pourra consulter pour un bon survol:

[B06] D. Bakry Functional Inequalities for Markov semigroups, Probability measures on groups, Mumbai: Inde (2004).

ainsi que l'article précurseur :

[G75] L.GROSS *Logarithmic Sobolev inequalities*, American Journal of Mathematics, 1975, Vol. 97, No. 4, pp. 1061-1083

Une approche reliée fortement aux inégalités fonctionnelles permet de donner des résultats de convergence exponentielle reliant inégalités « Log-Sobolev » et décroissance de l'entropie. Les inégalités de Sobolev Logarithmiques s'écrivent en toute généralité en

$$Ent(f^2) \leq D\mathcal{E}(f, f),$$

où l'entropie est définie par

$$Ent(f) = \int_{E} f \log(f) d\pi - \int_{E} f d\pi \log \left(\int_{E} f d\pi \right)$$

On pourra donc s'intéresser grâce aux références précédentes à :

- En quoi les décroissances de l'entropie sont informatives pour la dynamique guidée par le semi-groupe de générateur \mathcal{L} .
- Comment relier les inégalités Log-Sobolev aux inégalités de trou spectral.
- Montrer qu'une inégalité Log-Sobolev de constante D entraine alors l'ergodicité à vitesse exponentielle

$$Ent(P_t f) \leqslant e^{-\frac{4t}{D}} Ent(f).$$

- Étudier l'effet de la dimension sur les inégalités Log Sobolev (propriété de tensorisation) en considérant deux semi-groupes de générateurs \mathcal{L}_1 (resp. \mathcal{L}_2) vérifiant une inégalité de « Log-Sobolev » de constantes D_1 pour une mesure π_1 (resp. D_2 pour une mesure π_2). On cherchera alors à démontrer une inégalité « Log-Sobolev » pour $\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2$ pour la mesure produit $\pi_1 \otimes \pi_2$.
- Étudier le cas particulier du processus d'Ornstein-Uhlenbeck pour ces inégalités fonctionnelles.

2.4.3 Diffusion de Kolmogorov

La diffusion générale la plus célèbre est assurément celle définie au travers de l'équation différentielle stochastique

$$dX_t = -\nabla U(X_t)dt + dB_t,$$

où U désigne un potentiel coercif, minoré (par 0). Difficile de donner un ouvrage de synthèse sur cette équation. On pourra consulter avec profit les ouvrages.

[ABC+] C.Ané, S.Blachère, D.Chafaï, P.Fougères, I.Gentil, F.Malrieu, C.Roberto, G.Scheffer Sur les inégalités de Sobolev logarithmiques, Société Mathématique de France, 2000.

[B94] D.Bakry, L'hypercontractivité et son utilisation en théorie des semigroupes, Lectures on Probability theory, Lecture Notes in Math. 1581, 1994

[R99] G. ROYER, Une initiation aux iné ?galités de Sobolev logarithmiques, S.M.F., Paris, 1999.

Cette diffusion est intimement à la dynamique décrivant le recuit simulé. Elle a le bon goût d'être symétrique avec une mesure invariante explicite. On pourra étudier sur cette équation :

- Des conditions de non explosion des trajectoires de cette équation différentielle stochastique.
- La nature spectrale et auto-adjointe de la dynamique par rapport à la dynamique $\pi \propto e^{-2U}$.
- La convergence du semi-groupe vers la mesure stationnaire explicite ici, dès lors que certaines conditions sont satisfaites. Par exemple, on regardera dans [ABC+] les implications du critère « Courbure-Dimension » sur la Hessienne de U.
- Une extension du point précédent sera de considérer éventuellement des inégalités de Sobolev Logarithmiques découlant du critère « Γ_2 ».
- Sous quelle condition de drift b la diffusion

$$dX_t = b(X_t)dt + dB_t,$$

possède π comme mesure stationnaire qui rend $\mathcal L$ symétrique.

2.4.4 Équations de Fokker-Planck cinétiques

Il s'agit peut être des équations naturellement dégénérées les plus étudiées jusqu'à présent. Elles interviennent à la suite d'une modélisation proposée pour l'évolution de la position d'une molécule dans l'eau et font intervenir le système couplé vitesse/position (X_t, V_t) :

$$\begin{cases} dX_t = V_t dt \\ dY_t = -U'(X_t) dt - Y_t dt + dB_t \end{cases}$$

Les références sont nombreuses sur ce sujet. On pourra consulter :

[BBCG08] BAKRY, D BARTHE F. CATTIAUX P. GUILLIN A. A simple proof of the poincaré inequality for a large class of probability measures. Electronic Communications in Probability, 13:60?66, 2008.

[N67] E. Nelson. *Dynamical theories of Brownian motion*. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1967.

[V09] C. VILLANI. *Hypocoercivity*. Mem. Amer. Math. Soc., 202(950):iv+141, 2009.

[V06] C. VILLANI. *Hypocoercive diffusion operators*. In International Congress of Mathematicians. Vol. III, pages 473-498. Eur. Math. Soc., Z?rich, 2006.

De très nombreuses questions sont non triviales :

- Donner des éléments de modélisation convaincants sur le système différentiel.
- Donner des formules explicites dans le cas gaussien où $U(x) = ax^2/2$ pour la distribution $P_t\mu$ où μ est une distribution gaussienne lors de l'initialisation de X_0 . Proposer graphiquement une illustration de la convergence à l'équilibre.

- Quelles conditions sur U assurent la non explosion du système dynamique?
- Quelles conditions sur U assurent que la loi $P_t\mu$ est absoluement continue par rapport à la mesure de Lebesgue, en tout temps t strictement positif.
- Quelle est la mesure invariante du processus, comment obtenir des vitesses de convergence par méthode de couplage?
- Comment utiliser également les fonctions de Lyapunov pour obtenir des inégalités fonctionnelles (Poincaré par exemple).
- Utiliser des stratégies de modification de la norme ambiante pour obtenir des convergences exponentielles.

2.4.5 Modèle TCP

Le modèle est une simplification d'évolution de trafic TCP/IP. Ce modèle est par essence dynamique et aléatoire. C'est un cas particulier de processus dit PDMP (Piecewise Deterministic Markov Process). Des références récentes sur le sujet sont

[BCM+12] J.-B. BARDET, A. CHRISTEN, F. MALRIEU, A. GUILLIN, P.-A. ZITT *Total variation estimates for the TCP process* Electronic Journal in Probability, to appear.

[FGM12] J. FONBONA, F. MALRIEU, H. GUÉRIN Quantitative estimates for the long time behavior of an ergodic variant of the telegraph process Advances in Applied Probability (2012) Vol 44, no. 4, 977-994

[CMP10] D. CHAFAÏ, F. MALRIEU, K. PAROUX On the long time behavior of the TCP window size process Stochastic Processes and their Applications (2010) Vol. 120, no. 8, 1518-1534

L'idée est de modéliser l'intensité d'un trafit croissante avec le temps jusqu'à un temps exponentiel de séparation sur d'autres serveurs pù l'intensité du trafic est alors « coupée en deux ». On pourra s'intéresser à

- Proposer une modélisation pertinente du processus, ainsi que des simulations numériques et justifier précisément l'expression du générateur infinitésimal du processus.
- Étudier la convergence exponentielle vers une mesure stationnaire par méthode de couplage.

Chapitre 3

Algorithmes stochastiques

3.1 Introduction

Les algorithmes stochastiques sont des exemples concrets de dynamique Markovienne où le processus peut suivre un comportement qui n'est pas « stationnaire » au sens où lorsque le nombre d'itérations de l'algorithme grandit, il n'est pas distribué selon une mesure invariante chargeant tous les points de l'espace, mais qui au contraire se concentre sur l'inconnue qu'on souhaite retrouver.

Les références bibliographiques incontournables pour ce chapitre sont assurément

[B99] M. Benaïm Dynamics of stochastic approximation algorithms. Séminaire de Probabilités (Strasbourg), 33, pp 1-68, 1999.

[BMP90] A. BENVENISTE, M. MÉTIVIER, P. PRIOURET Adaptive algorithms and stochastic approximations. Springer Verlag, Applications of Mathematics, vol. 22, Berlin, Heidelberg, New York, 1990 (also available in French, Masson 1987).

[D97] M. Duflo Random Iterative Models. Springer Verlag, New-York, 1997.

[K77] H. Kushner Probability Methods for Approximations in Stochastic Control and for Elliptic Equations. Academic Press, 1977.

[KC78] H. J. Kushner, Clark D. S. Stochastic Approximation Methods for constrained and unconstrained systems. Springer, 1978.

3.1.1 Un premier exemple introductif

Calcul récursif d'une moyenne empirique L'estimation de la moyenne par la moyenne empirique issue de la loi des grands nombres est le premier algorithme stochastique communément connu!

Considérons (X_n) une suite de v.a. i.i.d. réelle de loi μ intégrable et d'espérance m:

$$\mathbb{E}[X_1] = m.$$

D'après la Loi (forte) des Grands Nombres,

$$\bar{X}_n := \frac{X_1 + \ldots + X_n}{n} \xrightarrow{n \to +\infty} m \quad p.s.$$

On peut re-écrire cette suite $(\bar{X}_n)_{n\in\mathbb{N}}$ récursivement :

$$\bar{X}_{n+1} = \frac{n}{n+1}\bar{X}_n + \frac{1}{n+1}X_{n+1}$$
$$= \bar{X}_n + \frac{1}{n+1}(X_{n+1} - \bar{X}_n).$$

On constate immédiatement que la suite des moyennes empiriques est bien une chaine de Markov, où l'innovation est portée par l'observation X_{n+1} .

Notation 3.1.1 (Tribu, pas) On note la tribu canonique $\mathcal{F}_n^X := \sigma(X_1, \dots, X_n)$, et on définit la suite de pas :

$$\forall n \in \mathbb{N}^* \qquad \gamma_n := 1/n.$$

On considère la fonction h définie par :

$$\forall x \in \mathbb{R}$$
 $h(x) = \frac{1}{2}\mathbb{E}[X_1 - x]^2$.

Alors, la suite des moyennes empiriques s'écrit assez simplement

$$\bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n - \gamma_{n+1} \nabla_x h(\bar{X}_n) + \gamma_{n+1} \Delta M_{n+1},$$

où

$$\Delta M_{n+1} = -(X_{n+1} - \bar{X}_n) + \mathbb{E}[(X_{n+1} - \bar{X}_n)/\mathcal{F}_n] = -(X_{n+1} - \bar{X}_n) + \nabla_x h(\bar{X}_n).$$

 \bar{X}_{n+1} est donc égal à \bar{X}_n plus un terme de dérive (descente de gradient de h) et un terme centré de type accroissement de martingale.

Ecriture récursive de la moyenne et de la variance empirique Intéressons-nous maintenant à l'approximation simultanée de la moyenne m et de la variance σ^2 . On pose

$$S_n^2 := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (X_k - \bar{X}_n)^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k^2 - \bar{X}_n^2.$$

On a:

$$S_{n+1}^{2} = \frac{1}{n+1} \left(\sum_{k=1}^{n} \left(X_{k} - \bar{X}_{n} - \frac{1}{n+1} [X_{n+1} - \bar{X}_{n}] \right)^{2} \right)$$

$$= \frac{1}{n+1} \sum_{k=1}^{n} \left((X_{k} - \bar{X}_{n})^{2} + \frac{1}{(n+1)^{2}} [X_{n+1} - \bar{X}_{n}]^{2} - \frac{2}{n+1} [X_{k} - \bar{X}_{n}] [X_{n+1} - \bar{X}_{n}] \right)$$

$$= \frac{n}{n+1} S_{n}^{2} + \frac{1}{n+1} [X_{n+1} - \bar{X}_{n}]^{2} + \frac{1}{(n+1)^{2}} [X_{n+1} - \bar{X}_{n}]^{2}$$

$$= S_{n}^{2} - \gamma_{n+1} (S_{n}^{2} - (\bar{X}_{n} - X_{n+1})^{2}) - \gamma_{n+1}^{2} (X_{n+1} - \bar{X}_{n})^{2}.$$

Ainsi, en notant $Z_n = [\bar{X}_n, S_n^2]$, on obtient :

$$Z_{n+1} = Z_n - \gamma_{n+1} \left[H(Z_n, X_{n+1}) + (0, R_{n+1}) \right]$$

avec H la fonction définie par

$$H((\bar{x}, s^2), u) = (\bar{x} - u, s^2 - (\bar{x} - u)^2)$$
 et $R_{n+1} = \gamma_{n+1}(X_{n+1} - \bar{X}_n)^2$ (reste).

Là encore, on vérifie facilement que l'on peut écrire le système Markovien en

$$\mathbb{E}[H(Z_n, X_{n+1}) \mid \mathcal{F}_n] = h(Z_n),$$

οù

$$h(\bar{x}, s^2) = (\bar{x} - m, s^2 - (\bar{x} - m)^2 - \sigma^2).$$

Ainsi, en notant $\Delta M_{n+1} = H(Z_n, X_{n+1}) - h(Z_n)$, l'accroissement de martingale, on obtient la représentation :

$$Z_{n+1} = Z_n - \gamma_{n+1}h(Z_n) - \gamma_{n+1}(\Delta M_{n+1} + (0, R_{n+1}))$$

Par la Loi Forte des Grands Nombres,

$$Z_n \xrightarrow{n \to +\infty} (m, \sigma^2) = y^*$$

où y^* désigne l'unique zéro de la fonction h. En d'autres termes, cet algorithme peut se voir comme un algorithme aléatoire de recherche de zéro de la fonction h.

3.1.2 Modèle générique d'algorithme stochastique

Les deux exemples ci-dessus sont des représentants typiques d'algorithme stochastique. Le premier se traduit comme la recherche d'un minimum de la fonction h, le second comme la recherche d'un 0 d'une équation.

Définition 3.1.1 (Algorithme stochastique) Un algorithme stochastique sera défini par :

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1}h(X_n) + \gamma_{n+1}(\Delta M_{n+1} + R_{n+1})$$

où (γ_n) est une suite de réels strictement positifs telle que

$$\gamma_n \xrightarrow{n \to +\infty} 0$$
 et $\sum_{n \geqslant 1} \gamma_n = +\infty$.

La suite (ΔM_n) est une suite d'accroissements de martingale et (R_n) est une perturbation ou un reste négligeable (avec un sens à définir ensuite) lorsque $n \to +\infty$.

L'objectif du chapitre est alors de comprendre le comportement de l'algorithme lorsque l'on a de plus en plus de données, c'est-à-dire $n \to +\infty$.

- Convergence de l'algorithme?
- Vitesse?

Pour ce qui est de la première question, une première réponse heuristique est que si h est une fonction de rappel et admet un unique zéro x^* , alors

$$X_n \xrightarrow{n \to +\infty} x^*.$$

Pour la seconde question, on constate que dans les deux premiers exemples, la convergence est donnée par une loi des grands nombres, et donc la vitesse est en \sqrt{n} .

3.2 Algorithmes déterministes et descente de gradient

On considère la suite définie par récurrence :

$$x_{n+1} = x_n - \gamma_{n+1} h(x_n). (3.1)$$

L'idée est de voir l'équation précédente comme une discrétisation de l'équation différentielle ordinaire :

$$\frac{dy(t)}{dt} = -h(y_t). (3.2)$$

Dans l'équation précédente, il faut comprendre qu'on fait une interpolation du temps continu par une suite d'intervalles de taille de plus en plus petits. Si on définit

$$\tau_n = \sum_{j=1}^n \gamma_j,$$

alors on effectue heuristiquement l'approximation $x_n = y(\tau_n)$ puisque pour un pas petit (un entier n assez grand):

$$x_{n+1} = y(\tau_{n+1}) = y(\tau_n + \gamma_{n+1}) \simeq y(\tau_n) + \gamma_{n+1}y'(\tau_n) = x_n - \gamma_{n+1}h(y(\tau_n)) \simeq x_n - \gamma_{n+1}h(x_n).$$

Ainsi, le temps peut être découpé en

$$[0, \tau_n] = [0, \tau_1] \cup [\tau_1, \tau_2] \dots \cup [\tau_{n-1}, \tau_n].$$

Pour une suite infinie de pas $(\gamma_n)_{n\geqslant 0}$, on peut calquer le comportement des solutions de (3.1) au comportement asymptotique des solutions de (3.2) à la condition sine qua none que

$$\tau_n \to +\infty$$
 c'est-à-dire $\sum_{j \ge 1} \gamma_j = +\infty$.

Les questions qu'on regarde par la suite est

- Quel est le comportement en temps long des solutions de (3.2)?
- Comment l'algorithme approche-t-il les solutions de l'équation continue?
- Sous quelles conditions cet algorithme converge-t-il? Vers quelle cible?

3.2.1 Pas constant

On se place dans le cadre où $\gamma_n=\gamma>0$ et l'ensemble des zéros de h est un singleton

$$\{x^*\} = \{h = 0\}.$$

On peut alors écrire le résultat sur le schéma algorithmique discrétisé suivant.

Proposition 3.2.1 Soit $h : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ continue telle que h satisfait la condition de « rappel » suivante :

$$\forall x \neq x^* \qquad \langle x - x^*, h(x) \rangle \geqslant C|h(x)|^2.$$

On pose:

$$x_{n+1}^{\gamma} = x_n^{\gamma} - \gamma h(x_n^{\gamma}).$$

Pour tout valeur initiale $x_0 \in \mathbb{R}^d$, il existe $\gamma_0 > 0$ tel que

$$\forall \gamma \in (0, \gamma_0) \qquad x_n^{\gamma} \xrightarrow{n \to +\infty} x^*.$$

Remarque 3.2.1 — En réalité, on peut obtenir le même genre de résultat en se restreignant à des sous-espaces où la condition du théorème sur h est vérifiée :

$$\forall x \neq x^*$$
 $\langle x - x^*, h(x) \rangle \geqslant C|h(x)|^2$.

- Il faut impérativement que le point de départ de l'algorithme soit dans ce sous-espace.
- En réalité, l'algorithme ne fonctionne qu'avec un pas bien choisi qui n'est pas forcément évident à régler a priori.

<u>Preuve</u>: Pour la preuve, on omet la dépendance de $(x_n^{\gamma})_{n\geq 0}$ à la taille de γ et notons plus simplement $(x_n)_{n\geq 0}$. On va démontrer que la suite se rapproche toujours de x^* .

$$|x_{n+1} - x^*|^2 = |x_n - x^*|^2 - 2\gamma \langle h(x_n), x_n - x^* \rangle + \gamma^2 |h(x_n)|^2.$$

On a donc:

$$|x_{n+1} - x^*|^2 = |x_n - x^*|^2 - \gamma [2\langle h(x_n), x_n - x^* \rangle - \gamma |h(x_n)|^2].$$

Par hypothèse, on sait que

$$\forall x \neq x^*$$
 $\frac{\langle x - x^*, h(x) \rangle}{h(x)^2} \geqslant C > 0.$

On définit ainsi

$$\gamma_0 = 2 \inf_{x \neq x^*} \left\{ \frac{\langle x - x^*, h(x) \rangle}{|h(x)|^2} \right\} > 0.$$
(3.3)

On a alors en prenant $\gamma \leqslant \gamma_0$ et en appliquant la minoration précédente à $x=x_n$ que

$$2\langle h(x_n), x_n - x^* \rangle \geqslant \gamma_0 |h(x_n)|^2 \geqslant \gamma h(x_n).$$

Ainsi, on obtient que

$$u_{n+1} := |x_{n+1} - x^*|^2 \le u_n := |x_n - x^*|^2.$$

et la suite $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une décroissante, minorée, donc convergente.

On en déduit que la suite $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est bornée et on extrait de cette suite une sous-suite convergente vers x_{∞} . On utilise enfin que la série de terme général $2\langle h(x_k), x_k - x^* \rangle - \gamma |h(x_k)|^2$ est convergente par le biais de la série telescopique formée par

$$\sum u_{n+1} - u_n.$$

Aussi, son terme général tend vers 0 et la valeur de x_{∞} ne peut être que x^* .

Par ailleurs, on peut avoir une idée de la vitesse puisque

$$\gamma \sum_{k=0}^{n-1} 2\langle h(x_k), x_k - x^* \rangle - \gamma |h(x_k)|^2 = |x_0 - x^*|^2 - |x_n - x^*|^2 \le |x_0 - x^*|^2.$$

Puis, on a par définition de γ_0 que

$$\gamma(\gamma_0 - \gamma) \sum_{k=0}^{n-1} |h(x_k)|^2 \le |x_0 - x^*|^2.$$

Maintenant, si h^2 est plate autour de x^* d'exposant β :

$$|h(x)|^2 \sim \kappa (x - x^*)^{\beta},$$

alors l'inégalité précédente implique l'heuristique

$$\kappa \gamma (\gamma_0 - \gamma) n |x_n - x^*|^{\beta} \lesssim |x_0 - x^*|^2.$$

Et donc pour une constance C assez grande, lorsque n tend vers $+\infty$:

$$|x_n - x^*| \lesssim C n^{-1/\beta}.$$

Ainsi, plus β est grand, moins la vitesse obtenue est bonne.

Remarque 3.2.2 On pourra démontrer que les conditions sont satisfaites si $h(x) = A(x-x^*)$ avec A matrice carrée définie positive en utilisant la décomposition spectrale de A.

3.2.2 Pas décroissant

Fonction de Lyapunov sous-quadratique On introduit à nouveau la notion importante de fonction de Lyapunov qui sera incontournable pour tout ce qu'on fera par la suite. Ici, les fonctions de Lyapunov sympathiques seront dites « sous-quadratiques ».

Définition 3.2.1 On dira que $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ est sous-quadratique si elle est de classe C^2 et si ∇V est une fonction Lipschitzienne au sens où :

$$\exists L > 0 \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^d \qquad |\langle \nabla V(x) - \nabla V(y), x - y \rangle| \leqslant L|x - y|^2.$$

Une telle fonction V est sous-quadratique car sous la condition ∇V Lipschitzienne, on vérifie facilement que sa croissance est au plus quadratique pour les grandes valeurs de x:

$$|V(x)| \leqslant C(1+|x|^2).$$

En fait, on peut même avoir que $V(x) \leq C + L/2|x|^2$ pour une constante C assez grande. La fonction $V(x) = |x - x^*|^2$ est un exemple de fonction de Lyapunov.

Énoncé On va maintenant énoncer une version à pas décroissant du premier résultat en utilisant en outre une fonction V sous-quadratique (au lieu de la fonction $V(x) = |x-x^*|^2$).

Proposition 3.2.2 Supposons données une fonction sous-quadratique positive V, et h continue telle que

$$\lim_{|x| \to +\infty} V(x) = +\infty, \quad \langle \nabla V, h \rangle \geqslant 0 \quad \text{et} \quad |h(x)|^2 \leqslant C(1 + V(x)).$$

Si

$$\operatorname{arg\,min} V = \{x^*\} \quad \text{et} \quad \langle \nabla V(x), h(x) \rangle > 0 \quad \forall x \neq x^*,$$

alors l'algorithme $x_{n+1} = x_n - \gamma_{n+1}h(x_n)$ converge vers x^* du moment que

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \gamma_n = +\infty \qquad et \qquad \sum_{n=1}^{+\infty} \gamma_n^2 < +\infty.$$

Remarque 3.2.3 Quelques remarques sur le résultat précédent.

- L'exemple fondamental est celui pour lequel $h = \nabla V$ où V est une fonction de Lyapunov sous-quadratique pour lequel $\{\nabla V = 0\}$ est réduit à un seul point. Dans ce cas, l'algorithme est une « descente de gradient » à pas décroissant.
- L'inconvénient de la méthode à pas décroissant par rapport à la méthode à pas constant est qu'elle converge moins vite vers x^* . C'est relativement clair puisque le temps τ_n grossit naturellement moins vite vers $+\infty$ (bien en dessous de linéairement) alors que dans le régime à pas constant, τ_n est linéaire en n. En revanche, la méthode à pas décroissant est beaucoup plus stable et comme on peut le voir ne nécessite pas de condition sur la taille du pas (relativement à un hypothétique γ_0).
- Il est très facile de donner un énoncé du résultat précédent en temps continu et la preuve est beaucoup plus simple que dans la situation discrète.

<u>Preuve</u>: L'idée est de se servir de l'évolution de $V(x_n)$ au lieu de celle de $|x_n - x^*|^2$. Une simple formule de Taylor à l'ordre 1 avec reste intégral donne

$$V(x_{n+1}) - V(x_n) - \gamma_{n+1} \langle \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle = \int_0^{\gamma_{n+1}} \langle \nabla V(x_n + h(x_n)s), h(x_n) \rangle ds$$
$$-\gamma_{n+1} \langle \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle$$
$$= \int_0^{\gamma_{n+1}} \langle \nabla V(x_n + h(x_n)s) - \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle ds$$

Notons $[\nabla V]_1$ la constante de Lipschitz de V. On a alors

$$|V(x_{n+1}) - V(x_n) - \gamma_{n+1} \langle \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle| \leq \int_0^{\gamma_{n+1}} s^{-1} |\langle \nabla V(x_n + h(x_n)s) - \nabla V(x_n), sh(x_n) \rangle| ds$$

$$\leq \int_0^{\gamma_{n+1}} [\nabla V]_1 \|h(x_n)s\|^2 ds$$

$$\leq \gamma_{n+1}^2 [\nabla V]_1 \|h(x_n)\|^2$$

En utilisant la majoration de h par V, on en déduit qu'il existe C assez grande telle que

$$V(x_{n+1}) \leq V(x_n) - \gamma_{n+1} \langle \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle + C \gamma_{n+1}^2 (1 + V(x_n))$$

$$\leq V(x_n) (1 + C \gamma_{n+1}^2) - \gamma_{n+1} \langle \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle + C \gamma_{n+1}^2.$$

A ce stade, $(V(X_n))_{n\geq 0}$ peut être vue comme une sorte de suite arithmético-géométrique mais avec une majoration plutôt qu'une égalité. On va essayer d'extraire de cette inégalité une suite décroissante. Plus précisément, en divisant les produits de $(1+C\gamma_n^2)$, on obtient :

$$\frac{V(x_{n+1}) + \sum_{k=1}^{n+1} \gamma_k \langle \nabla V(x_{k-1}), h(x_{k-1}) \rangle + C \sum_{k \geqslant n+1} \gamma_k^2}{\prod_{k=1}^{n+2} (1 + C \gamma_k^2)}$$

$$\leq \frac{V(x_n) + \sum_{k=1}^{n} \gamma_k \langle \nabla V(x_{k-1}), h(x_{k-1}) \rangle + C \sum_{k \geqslant n+1} \gamma_k^2}{\prod_{k=1}^{n} (1 + C \gamma_k^2)}.$$

On pose

$$H_n = \frac{V(x_n) + \sum_{k=1}^n \gamma_k \langle \nabla V(x_{k-1}), h(x_{k-1}) \rangle + C \sum_{k \geqslant n+1} \gamma_k^2}{\prod_{k=1}^n (1 + C\gamma_k^2)}.$$

Il s'agit d'une suite décroissante et minorée par hypothèse par 0, donc convergente. Comme $\sum \gamma_k^2$ est une série convergente,

$$\prod_{k=1}^{n} (1 + C\gamma_k^2) \quad \text{et} \quad C\sum_{k=1}^{n} \gamma_k^2 \quad \text{convergent},$$

ce qui implique à nouveau que

$$V(x_n) + \sum_{k=1}^n \gamma_k \langle \nabla V(x_{k-1}), h(x_{k-1}) \rangle \xrightarrow{n \to +\infty} l \in \mathbb{R}.$$

En conséquence, on obtient que

$$\sum_{k=1}^{+\infty} \gamma_k \langle \nabla V(x_{k-1}), h(x_{k-1}) \rangle \leqslant l,$$

et c'est une série à termes positifs. Ainsi :

$$(a): V(x_n) \xrightarrow{n \to +\infty} v_\infty \in \mathbb{R}_+ \quad \text{et} \quad (b): \sum_{k=1}^{+\infty} \gamma_k \langle \nabla V(x_{k-1}), h(x_{k-1}) \rangle < +\infty.$$

Comme $V(x) \to +\infty$ lorsque $|x| \to +\infty$, (a) implique que (x_n) est une suite bornée. De (b) et du fait que $\sum_{k\geqslant 0} \gamma_k = \infty$, on déduit que :

$$\liminf_{n \to +\infty} \langle \nabla V(x_n), h(x_n) \rangle = 0.$$

Quitte à extraire une sous-suite, on peut construire (x_{ϕ_n}) convergente vers x_{∞} telle que $v_{\infty} = V(x_{\infty})$ et dans ce cas $\langle \nabla V(x_{\infty}), h(x_{\infty}) \rangle = 0$. Ainsi, $x_{\infty} = x^*$ et $V(x_n) \xrightarrow{n \to +\infty} V(x^*)$ et il n'y a qu'une seule valeur d'adhérence possible x^* , il suit que $x_n \xrightarrow{n \to +\infty} x^*$.

Remarque 3.2.4 Si on suppose que ∇V est ρ -Holderienne, on peut également énoncer un résultat dans ce cadre. La différence provient alors des premières majorations dans la formule de Taylor à l'ordre 1.

3.3 Schéma stochastique

3.3.1 Motivations

L'idée d'étudier un schéma de la forme

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1}h(X_n) + \gamma_{n+1}(\Delta M_{n+1} + R_{n+1}), \tag{3.4}$$

répond à des motivations bien réelles dans des cas particulier.

Évaluation indirecte bruitée Imaginons que h soit le gradient d'une fonction U et qu'on cherche à minimiser U, ceci sans perte de généralité car la recherche de 0 d'une fonction et la minimisation du carré de la fonction sont équivalents. Si par malheur la fonction U ne peut être évaluée directement au point courant de l'algorithme, c'est à dire si $U(X_n)$ n'est mesurable qu'à une erreur centrée près, alors on ne peut pas exploiter les résultats concernant les algorithmes (3.1).

En effet, le schéma s'écrirait :

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1} h(X_n) + \gamma_{n+1} \xi_n,$$

et cette écriture correspond plus à un cas particulier de (3.4) avec un reste nul, plutôt qu'à un schéma déterministe (3.1).

Impossibilité numérique de calculer la dérive Si maintenant on imagine que U est donnée au travers d'une intégrale :

$$\forall x \in \mathbb{R}^d$$
 $U(x) = \int_F \mathcal{U}(x, y) \mu(dy),$

où μ est une mesure de probabilités sur un ensemble E a priori connu mais gros, il devient difficile de concevoir l'applicabilité numérique du schéma déterministe utilisant le calcul de h:

$$h(x) = \nabla U(x) = \int_{E} \partial_{x} \mathcal{U}(x, y) \mu(dy),$$

en tout point $(X_n)_{n\geqslant 1}$ de l'algorithme, car le calcul de l'intégrale sur E peut être couteux si aucune formule explicite n'est disponible pour la fonction h.

On peut malgré tout revenir à une formulation par algorithme stochastique en remarquant que si $(Y_n)_{n\geqslant 1}$ est une suite i.i.d. de loi μ sur E, alors l'algorithme

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1} \partial_x \mathcal{U}(X_n, Y_{n+1}),$$

peut se re-écrire en

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1}h(X_n) - \gamma_{n+1}\Delta M_{n+1},$$

puisque

$$\Delta M_{n+1} = h(X_n) - \partial_x \mathcal{U}(X_n, Y_{n+1}) = \int_E \partial_x \mathcal{U}(X_n, y) \mu(dy) - \partial_x \mathcal{U}(X_n, Y_{n+1})$$

est un accroissement de martingale :

$$\mathbb{E}\left[\Delta M_{n+1}|\mathcal{F}_n\right] = \int_E \partial_x \mathcal{U}(X_n, y)\mu(dy) - \mathbb{E}\left[\partial_x \mathcal{U}(X_n, Y_{n+1})|\mathcal{F}_n\right] = 0.$$

<u>Bilan</u>: si on suppose qu'on sait simuler μ , alors en notant $(Y_n)_{n\geqslant 1}$ une suite de v.a. i.i.d. de loi μ on implémente la suite :

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} (X_n, Y_{n+1})$$

qui peut se réécrire sous la forme :

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1} \nabla U(X_n) + \gamma_{n+1} \Delta M_{n+1}$$

οù

$$\Delta M_n = \nabla U(X_n) - \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x}(X_n, Y_{n+1}).$$

On retrouve une écriture de type algorithme stochastique qu'on appellera dans la suite « descente de gradient stochastique ». On doit donc répondre aux questions :

- (X_n) converge-t-elle vers x^* ?
- À quelle vitesse, sous quelles conditions...?

3.3.2 Rappels sur les martingales

Pour tous les rappels sur les martingales, une très bonne référence est

[W91] D. WILLIAMS *Probability with Martingales*, Cambridge Mathematical Textbooks, 1991.

Voici en vrac quelques rappels : des définitions, des inégalités célèbres ainsi que des théorèmes de convergence incontournables.

Définitions des concepts

Définition 3.3.1 (Martingale, Sur-martingale, Sous-martingale) Un processus $(X_n)_{n\geqslant 0}$ à valeur dans \mathbb{R}^d est appelé une (\mathcal{F}_n) -martingale si

- (i) (X_n) est (\mathcal{F}_n) -adapté.
- (ii) $\mathbb{E}[|X_n|] < +\infty$ pour tout $n \ge 0$.
- (iii) $\mathbb{E}[X_{n+1}|\mathcal{F}_n] = X_n \text{ pour tout } n \ge 0.$

De même, un processus $(X_n)_{n\geqslant 0}$ est appelé une (\mathcal{F}_n) sur-martingale losqu'il satisfait (i), (ii) et (iii'):

$$\mathbb{E}[X_{n+1}|\mathcal{F}_n] \leqslant X_n \qquad \forall n \geqslant 0.$$

Enfin, un processus $(X_n)_{n\geqslant 0}$ est appelé une (\mathcal{F}_n) sous-martingale lorsqu'il satisfait (i), (ii) et (iii'')

$$\mathbb{E}[X_{n+1}|\mathcal{F}_n] \geqslant X_n \qquad \forall n \geqslant 0.$$

Définition 3.3.2 (Suite prévisible) On dira ensuite qu'une suite $(Y_n)_{n\geqslant 0}$ est $(\mathcal{F}_n)_{n\geqslant 0}$ prévisible si Y_{n+1} est \mathcal{F}_n -mesurable, pour tout entier n:

$$\mathbb{E}\left[Y_{n+1}\middle|\mathcal{F}_n\right] = Y_{n+1}.$$

Proposition 3.3.1 (Décomposition de Doob) Soit (X_n) une sous-martingale (resp. sur-martingale) réelle. Alors, il existe un unique processus croissant (décroissant) prévisible $(A_n)_{n\geqslant 0}$ nul en 0 tel que $X_n=M_n+A_n$ où (M_n) est une martingale. De plus

$$A_n - A_{n-1} = \mathbb{E}[X_n - X_{n-1} | \mathcal{F}_{n-1}].$$

Définition 3.3.3 (Crochet d'une martingale de carré intégrable) Soit (M_n) une martingale de carré intégrable à valeurs réelles. Alors, (M_n^2) est une sous-martingale car $x \mapsto x^2$ est convexe. On note $(\langle M \rangle_n)$ le crochet de M, i.e. l'unique processus prévisible croissant nul en 0 tel que $M_n^2 - \langle M \rangle_n$ est une martingale. On a :

$$< M >_{n+1} - < M >_n = \mathbb{E}[(M_{n+1} - M_n)^2 / \mathcal{F}_n].$$

Inégalités classiques

Théorème 3.3.1 (Inégalités de Doob, Inégalité de Burkholder-Davis-Gundy) On peut énoncer ces inégalités ainsi.

Inégalité de Doob : Soit (X_n) une martingale ou une sous-martingale positive. On a pour tout $N \ge 0$, pour tout $p \ge 1$,

$$\mathbb{P}\left(\sup_{0 \le n \le N} |X_n| \ge a\right) \le \frac{1}{a^p} \mathbb{E}\left[|X_N|^p\right].$$

Inégalité de B-D-G : (X_n) martingale ou sous-martingale positive, p > 1.

$$\mathbb{E}\left[\sup_{0\leqslant n\leqslant N}|X_n|^p\right]\leqslant \left(\frac{p}{p-1}\right)^p\mathbb{E}[|X_N|^p]$$

En particulier, si (X_n) est une martingale nulle en 0,

$$\mathbb{E}\left[\sup_{0 \le n \le N} |X_n|^2\right] \le \mathbb{E}[< X >_n^2]$$

et

$$\sup X_n \in L^p \text{ si et seulement si } \sup_{n \ge 0} \mathbb{E}[|X_n|^p] < +\infty.$$

Résultats de convergence

Théorème 3.3.2 (Sous-martingale) Soit (X_n) une sur-martingale ou une sous-martingale telle que

$$\sup_{n\geqslant 1}\mathbb{E}[|X_n|]<+\infty.$$

Alors, $(X_n)_{n\geq 0}$ converge p.s. vers X_{∞} intégrable.

Théorème 3.3.3 (Sur-Martingale) On a les deux résultats :

- i) Soit (X_n) une martingale ou une sur-martingale positive, alors (X_n) converge p.s.
- ii) Si en plus elle est bornée dans L^p avec p > 1, alors (X_n) converge en plus dans L^p .

Théorème 3.3.4 Soit (X_n) une martingale de carré intégrable. Alors,

- i) Sur $\{\langle X \rangle_{\infty}\} \langle +\infty \}$, (X_n) converge p.s. dans \mathbb{R} . ii) Sur $\{\langle X \rangle_{\infty} = +\infty \}$, $\frac{X_n}{\langle X \rangle_n} \xrightarrow{n \to +\infty} 0$ p.s.

3.3.3 Théorème de Robbins-Siegmund

Nous allons établir un premier résultat sur les schémas stochastiques. Ce résultat est connu sous le nom de Théorème de Robbins-Siegmund. On se place sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.

Théorème 3.3.5 (Robbins-Siegmund) On considère une filtration $(\mathcal{F}_n)_{n\geq 0}$ et quatre suites de v.a. (U_n) , (V_n) , (α_n) et (β_n) qui sont (\mathcal{F}_n) -adaptées, positives et intégrables vérifiant

(i) (α_n) , (U_n) et (β_n) sont des suites prévisibles.

(ii)
$$\sup_{\omega \in \Omega} \prod_{n \ge 1} (1 + \alpha_n(\omega)) < +\infty \ et \sum_{n \ge 0} \mathbb{E}[\beta_n] < +\infty.$$

(iii) $\forall n \in \mathbb{N},$

$$\mathbb{E}[V_{n+1}|\mathcal{F}_n] \le V_n(1 + \alpha_{n+1}) + \beta_{n+1} - U_{n+1}.$$

Alors,

$$\begin{cases} (a) & V_n \xrightarrow{n \to +\infty} V_{\infty} \in L^1 & et & \sup_{n \ge 0} \mathbb{E}[V_n] < +\infty. \\ (b) & \sum_{n \ge 0} \mathbb{E}[U_n] < +\infty & et & \sum_{n \ge 0} U_n < +\infty & p.s. \end{cases}$$

Remarque 3.3.1 Dans la suite, (V_n) sera le plus souvent $V(X_n)$ où V est une fonction de Lyapunov et (X_n) l'algorithme. Ce résultat signifie donc que sous un contrôle de type (iii), obtient la convergence de $(V(X_n))$ lorsque $n \to +\infty$. Ainsi, sous de bonnes hypothèses sur V, on obtient la convergence de l'algorithme (X_n) .

<u>Preuve</u> : L'idée est de construire une sur-martingale à partir de l'inégalité (iii). Cette idée correspond à la suite décroissante dans le cas déterministe.

Majorations préliminaires Remarquons tout d'abord que puisque la suite $(U_n)_{n\geqslant 0}$ est prévisible, alors

$$\mathbb{E}\left[V_{n+1} + \sum_{k=1}^{n+1} U_k | \mathcal{F}_n\right] \leq V_n (1 + \alpha_{n+1}) + \sum_{k=1}^n U_k + \beta_{n+1}.$$

$$\leq \left(V_n + \sum_{k=1}^n U_k\right) (1 + \alpha_{n+1}) + \beta_{n+1}.$$

Aussi, si on définit

$$S_n := \frac{V_n + \sum_{k=1}^n U_k}{\prod_{k=1}^n (1 + \alpha_k)},$$

alors on constate immédiatement que

$$\mathbb{E}[S_{n+1}|\mathcal{F}_n] \leqslant S_n + \tilde{\beta}_{n+1}$$

οù

$$\tilde{\beta}_n = \frac{\beta_n}{\prod_{k=1}^n (1 + \alpha_k)}.$$

Si on note $B_n := \sum_{k=1}^n \tilde{\beta}_k$, alors la suite $(B_n)_{n\geqslant 0}$ est une suite positive croissante, donc convergente vers une variable aléatoire notée B_{∞} . Comme $\tilde{\beta}_n \leqslant \beta_n$, la condition (ii) implique alors que $B_{\infty} \in L^1$:

$$\mathbb{E}B_{\infty} < +\infty.$$

Construction d'une sur-martingale On pose $\tilde{S}_n = S_n + \mathbb{E}[B_{\infty}|\mathcal{F}_n] - B_n$. Comme la suite $(\beta_n)_{n\geq 0}$ est prévisible, on peut écrire que

$$\mathbb{E}[\tilde{S}_{n+1}|\mathcal{F}_n] \leqslant S_n + \tilde{\beta}_{n+1} + \mathbb{E}[B_{\infty}|\mathcal{F}_n] - \mathbb{E}[B_{n+1}|\mathcal{F}_n]$$
$$\leqslant S_n + \mathbb{E}[B_{\infty}|\mathcal{F}_n] - B_{n+1} + \tilde{\beta}_{n+1} = \tilde{S}_n.$$

 $(S_n)_{n\geq 0}$ est donc une sur-martingale car on a en plus que

$$\mathbb{E}|\tilde{S}_n| \leqslant \mathbb{E}S_n + \mathbb{E}B_{\infty} < +\infty.$$

De plus, (\tilde{S}_n) est positive car

$$\tilde{S}_n = S_n + \mathbb{E}\left[B_{\infty} - B_n | \mathcal{F}_n\right]$$

et $(B_n)_{n\geqslant 0}$ est une suite croissante. Ainsi, le théorème de convergence des sur-martingales positives implique:

$$\tilde{S}_n \xrightarrow{n \to +\infty} \tilde{S}_\infty \in L^1.$$

De plus, comme $\mathbb{E}[B_{\infty}|\mathcal{F}_n] - B_n \xrightarrow{n \to +\infty} B_{\infty} - B_{\infty} = 0$ p.s. et dans L^1 , il suit que (S_n) converge p.s. vers $S_{\infty} := \tilde{S}_{\infty}$ et par ailleurs $S_{\infty} \in L^1$. En particulier, le théorème de Tonelli implique immédiatement que

$$\sup \mathbb{E}[S_n] < +\infty.$$

Retour à $(V_n)_{n\geqslant 0}$ et $(U_n)_{n\geqslant 0}$ On s'intéresse à nouveau aux deux suites $(V_n)_{n\geqslant 0}$ et $(U_n)_{n\geqslant 0}$. On sait par définition que

$$\mathbb{E}[V_n] + \mathbb{E}\left[\sum_{k=1}^n U_k\right] = \prod_{k=1}^n (1+\alpha_k) \mathbb{E}[S_n] \leqslant \left\|\prod_{k=1}^{+\infty} (1+\alpha_k)\right\|_{\infty} \mathbb{E}[S_n].$$

On obtient donc dans un premier temps que

$$\sup_{n \ge 1} \mathbb{E}[V_n] < +\infty \quad \text{et} \quad \mathbb{E}\left[\sum_{k > 1} U_k\right] < +\infty.$$

En particulier $\sum_{k\geqslant 1} U_k < +\infty$ p.s., ce qui démontre le (b). Comme $S_n \to S_\infty$ et que $\prod_{k\geqslant 1} (1+\alpha_k) < +\infty$, il suit facilement que

$$S_n \prod_{k \ge 1}^n (1 + \alpha_k) - \sum_{k \ge 1}^n U_k = V_n \xrightarrow{n \to +\infty} V_\infty = S_\infty \prod_{k \ge 1} (1 + \alpha_k) - \sum_{k \ge 1} U_k$$

p.s. et dans L^1 . Cela démontre le (a) et achève la démonstration.

3.3.4 Applications aux algorithmes stochastiques

On revient désormais au contexte d'application de nos méthodes stochastiques et on considère l'algorithme défini auparavant dans (3.4) par $X_0 = x_0 \in \mathbb{R}^d$ et

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1}h(X_n) + \gamma_{n+1}(\Delta M_{n+1} + R_{n+1})$$
(3.5)

où $(\gamma_n)_{n\geqslant 0}$ est une suite de réels strictement positifs vérifiant

$$\gamma_n \xrightarrow{n \to +\infty} 0, \quad \sum_{n \ge 1} \gamma_n = +\infty, \quad \sum_{n \ge 1} \gamma_n^2 < +\infty.$$
(3.6)

On déduit du théorème de Robbins-Siegmund le résultat de convergence suivant :

Théorème 3.3.6 (Convergence de la méthode du gradient stochastique) $Soit(X_n)_{n\geqslant 0}$ une suite de variables aléatoires définies par (3.5), et telles que $(\gamma_n)_{n\geqslant 0}$ satisfait (3.6). On se donne V une fonction sous-quadratique positive de classe C^2 vérifiant : $(\mathbf{H_1})$: (hypothèse de « drift »)

$$m := \min_{x \in \mathbb{R}^d} V(x) > 0 \quad \lim_{|x| \to +\infty} V(x) = +\infty, \quad \langle \nabla V, h \rangle \geqslant 0 \quad \text{et} \quad |h|^2 + |\nabla V|^2 \leqslant C(1+V).$$

(H₂): (contrôle des perturbations)

(i) (ΔM_n) est une suite d'accroissements d'une (\mathcal{F}_n) -martingale vectorielle telle que

$$\mathbb{E}[|\Delta M_n|^2 | \mathcal{F}_{n-1}] \leqslant C(1 + V(X_{n-1})) \qquad \forall n \in \mathbb{N}.$$

(ii) (R_n) est (\mathcal{F}_n) -adaptée et

$$\mathbb{E}[|R_n|^2|\mathcal{F}_{n-1}] \le C\gamma_n^2(1 + V(X_{n-1})).$$

Alors, sous $(\mathbf{H_1})$ et $(\mathbf{H_2})$, on a :

$$(a) \sup_{n \geqslant 0} \mathbb{E}[V(X_n)] < +\infty, \quad (b) \sum_{n \geqslant 0} \gamma_{n+1} \langle \nabla V, h \rangle (X_n) < +\infty \quad p.s.$$

$$(c)V(X_n) \xrightarrow{n \to +\infty} V_{\infty} \in L^1 \quad p.s.,$$

Si de plus D²V est non dégénérée (partout), alors

$$(d)X_n - X_{n-1} \xrightarrow{n \to +\infty} 0$$
 p.s. et dans L^2 .

Remarque 3.3.2 On peut faire les quelques remarques suivantes.

- On peut supposer que X_0 est aléatoire du moment que $\mathbb{E}[V(X_0)] < +\infty$.
- Si l'algorithme prend ses valeurs dans un convexe de \mathbb{R}^d (exemple : algorithme sto-chastique), il suffit que les hypothèses sur V soient satisfaites sur le convexe.
- Le fait que

$$\sum_{n\geq 0} \gamma_{n+1} \langle \nabla V, h \rangle (X_n) < +\infty \quad p.s.,$$

que $\langle \nabla V, h \rangle \geqslant 0$ et que $\sum \gamma_n = +\infty$ impliquent que

$$\liminf_{n \to +\infty} \langle \nabla V, h \rangle (X_n) = 0 \quad p.s.$$

Preuve: On utilisera la notation:

$$D^{2}V(x)y^{\otimes 2} = \sum_{k,l} \frac{\partial^{2}V}{\partial x_{k}\partial x_{l}}(x)y_{k}y_{l}.$$

Majoration issue des formules de Taylor D'après la formule de Taylor à l'ordre 2, il existe une suite $(\xi_n)_{n\geqslant 0}$ telle que

$$V(X_{n+1}) = V(X_n) - \gamma_{n+1} \langle \nabla V(X_n), h(X_n) \rangle (X_n) + \gamma_{n+1} \langle \nabla V, \Delta M_{n+1} \rangle$$
$$+ \gamma_{n+1} \langle \nabla V(X_n), R_{n+1} \rangle + \frac{1}{2} D^2 V(\xi_{n+1}) (\Delta X_{n+1})^{\otimes 2}$$

où ξ_{n+1} est un élément du segment $[X_n, X_{n+1}]$ et $\Delta X_{n+1} = X_{n+1} - X_n$. D'abord, comme V est sous-quadratique, on en déduit que D^2V est bornée (pour n'importe quelle norme) et finalement :

$$\left| \frac{1}{2} D^2 V(\xi_{n+1}) (\Delta X_{n+1})^{\otimes 2} \right| \leq C |\Delta X_{n+1}|^2 \leq C \gamma_{n+1}^2 (|h(X_n)|^2 + |\Delta M_{n+1}|^2 + |R_{n+1}|^2).$$

Ainsi, en utilisant les hypothèses du théorème, on obtient qu'il existe une constante C assez grande pour laquelle :

$$\mathbb{E}\left[\left|\frac{1}{2}D^{2}V(\xi_{n+1})(\Delta X_{n+1})^{\otimes 2}\right||\mathcal{F}_{n}\right] \leqslant C\gamma_{n+1}^{2}(1+V(X_{n})). \tag{3.7}$$

Finalement, comme ΔM_n est un accroissement de martingale et que V est minoré par m strictement positif, quitte à modifier encore la constante C, on peut écrire que

$$\mathbb{E}\left[V(X_{n+1})|\mathcal{F}_n\right] \leqslant V(X_n)(1+C\gamma_{n+1}^2) + \gamma_{n+1}\mathbb{E}\left[\left|\left\langle \nabla V(X_n), R_{n+1}\right\rangle\right|\right|\mathcal{F}_n\right] - \gamma_{n+1}\left\langle \nabla V(X_n), h(X_n)\right\rangle. \tag{3.8}$$

D'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz et l'hypothèse sur R_n :

$$\mathbb{E}[|\langle \nabla V(X_n), R_{n+1} \rangle||\mathcal{F}_n] \leq \mathbb{E}[|\nabla V(X_n)| \times |R_{n+1}||\mathcal{F}_n]$$

$$= |\nabla V(X_n)|\mathbb{E}[|R_{n+1}||\mathcal{F}_n]$$

$$\leq |\nabla V(X_n)|\sqrt{\mathbb{E}[|R_{n+1}|^2|\mathcal{F}_n]}$$

$$\leq C\gamma_{n+1}\sqrt{1 + V(X_n)}|\nabla V(X_n)|.$$

À nouveau, le caractère sous-quadratique du potentiel permet de déduire que

$$|\nabla V(x)| = \mathcal{O}_{|x| \mapsto +\infty}(\sqrt{V(x)}),$$

et finalement en modifiant encore une fois la constante C, on a

$$\mathbb{E}[|\langle \nabla V(X_n), R_{n+1} \rangle||\mathcal{F}_n] \leqslant C\gamma_{n+1}V(X_n).$$

Ainsi, (3.8) implique

$$\mathbb{E}\left[V(X_{n+1})|\mathcal{F}_n\right] \leqslant V(X_n)(1 + C\gamma_{n+1}^2) - \gamma_{n+1}\langle \nabla V(X_n), h(X_n)\rangle$$
(3.9)

Application du théorème de Robbins-Siegmund Si on définit les quantités

$$V_n := V(X_n), \quad U_{n+1} := \gamma_{n+1} \langle \nabla V, h \rangle (X_n), \quad \alpha_n := C \gamma_n^2, \quad \beta_{n+1} = 0,$$

on re-écrit (3.9) en (iii) du théorème précédent :

$$\mathbb{E}[V_{n+1}|\mathcal{F}_n] \leq V_n(1 + \alpha_{n+1}) + \beta_{n+1} - U_{n+1}.$$

On peut vérifier que les hypothèses du théorème précédent sont satisfaites :

- $-(\alpha_n)_{n\in\mathbb{N}}, (\beta_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(U_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sont bien des suites $(\mathcal{F}_n)_{n\in\mathbb{N}}$ prévisibles donc (i) est vérifié.
- Le produit $\prod_{k=1} (1 + \alpha_k)$ est convergent donc (ii) est vérifié.

Le théorème de Robbins-Siegmund implique alors que V_n converge vers V_∞ dans L_1 et la série des U_n est presque sûrement convergente. Cela prouve donc les points (a), (b), et (c). Pour le (d), on sait que comme D^2 est non dégénérée :

$$\forall x \in \mathbb{R}^d \qquad |D^2(x)| \geqslant \lambda_0 > 0.$$

Puis,

$$\mathbb{E}\left[\left|\Delta X_{n+1}\right|^{2} |\mathcal{F}_{n}\right] \leqslant \frac{\lambda_{0}^{-1}}{2} \mathbb{E}\left[\left|\frac{1}{2} D^{2} V(\xi_{n+1}) (\Delta X_{n+1})^{\otimes 2}\right| |\mathcal{F}_{n}\right] \leqslant C \gamma_{n+1}^{2} (1 + V(X_{n})).$$

En fin de compte, on obtient :

$$\sum \mathbb{E}\left[|\Delta X_{n+1}|^2\right] \leqslant C \sum_{n>0} \gamma_{n+1}^2 (1 + V(X_n)) < +\infty.$$

Ceci implique que

$$\mathbb{E}[|\Delta X_n|^2] \xrightarrow{n \to +\infty} 0 \quad \text{et} \quad \sum |\Delta X_{n+1}|^2 < +\infty \quad p.s.$$

Donc en particulier, $\Delta X_n \xrightarrow{n \to +\infty} 0$ p.s.

Corollaire 3.3.1 (Théorème de Robbins-Monro) On se place sous les hypothèses du Théorème (3.3.6) et on suppose de plus que : h est continue et que

$$\{x, \langle \nabla V(x), h(x) \rangle = 0\} = \{x^*\}.$$

Alors,

- (α) x^* est l'unique minimum de V.
- $(\beta) X_n \xrightarrow{n \to +\infty} x^* p.s. \ et \langle \nabla V, h \rangle (X_n) \xrightarrow{n \to +\infty} 0.$
- (γ) Soit $\psi_p(x) = |x|^p$ avec p > 0 telle $\psi_p(x) \leq CV^p(x)$ avec $\rho \in [0, 1)$. Alors,

$$\mathbb{E}[(\psi_p(X_n - x^*)] \xrightarrow{n \to +\infty} 0.$$

<u>Preuve</u>: Point (α) : on sait que V admet un minimum, et pour ce minimum on a bien $\hat{\text{sur}} \langle \nabla V(x), h(x) \rangle = 0$. Par hypothèse, cela implique que $\{\nabla V = 0\} = \{x^*\}$

Point (β) : d'après le théorème précédent, on sait que

$$\sum_{n} \gamma_{n+1} \langle \nabla V, h \rangle (X_n) < +\infty \quad p.s.$$

On choisit $\omega \in \tilde{\Omega} \subset \Omega$ pour lequel la convergence a lieu et telle que la suite $X_n(\omega)$ est bornée. Cet ensemble Omega est de mesure 1 d'après le théorème précédent. Supposons que par ailleurs $V_{\infty}(\omega) > m$, comme V est une fonction continue qui atteint son minimum en x^* , on en déduit alors qu'il existe un entier n_0 , M > 0 et $\epsilon > 0$ tels que

$$\forall n \geqslant n_0 \qquad X_n(\omega) \in B(x^*, \epsilon)^c \cap B(0, M)$$

Mais la fonction $x \mapsto \langle \nabla V(x), h(x) \rangle$ est continue sur $B(x^*, \epsilon)^c \cap B(0, M)$ et donc minorée par un réel c > 0. Dans ce cas, on obtient alors

$$\sum_{n} \gamma_{n+1} \langle h(X_n), \nabla U(X_n) \rangle \geqslant c \sum_{n} \gamma_{n+1} = +\infty.$$

Cela est contradictoire et on en déduit alors que sur l'ensemble $\tilde{\Omega}$, la suite X_n converge vers x^* .

Point (γ) : on va utiliser un argument d'équi-intégrabilité. On fixe M>0. Par convergence dominée,

$$\mathbb{E}[(\psi_p(X_n - x^*)1_{\psi_p(X_n - x^*) \leq M}] \xrightarrow{n \to +\infty} 0.$$

D'autre part, par Holder

$$\mathbb{E}[\psi_p(X_n - x^*) 1_{\psi_p(X_n - x^*) > M}] \leq \mathbb{E}[(\psi_p(X_n - x^*))^{1/\rho}]^{\rho} \mathbb{P}(\psi_p(X_n - x^*) > M)^{1-\rho}$$

$$\leq \sup_{n \geq 1} \mathbb{E}[V(X_n)] \mathbb{P}(\psi_p(X_n - x^*) > M)^{1-\rho}$$

$$\leq C \mathbb{P}(\psi_p(X_n - x^*) > M)^{1-\rho}.$$

Par convergence dominée, il suit que

$$\lim \sup_{M \to +\infty} \mathbb{E}[\psi_p(X_n - x^*) 1_{\psi_p(X_n - x^*) > M}] = 0$$

puis le résultat.

Exemple 3.3.1 Un problème de moindres carrés récursif. On considère $\xi_1, \ldots, \xi_n, \ldots$ un ensemble de vecteurs de \mathbb{R}^d (les entrées) et on souhaite approcher une relation $\xi \to F(\xi)$ par un modèle linéaire au travers d'un critère de moindre carrés, i.e. on veut minimiser :

$$V: C \in \mathbb{R}^d \mapsto \sum_{k=1}^n (F(\xi_k) - \langle C, \xi_k \rangle)^2 = \mathbb{E}_\mu \left[(F(\xi) - \langle C, \xi \rangle)^2 \right]$$

où $\mu = 1/n \sum_{k=1}^n \delta_{\xi_k}$. On note la matrice de Gramm $A(\xi) := \xi \xi^t$. Des simples calculs montrent que

$$\nabla V(C) = \mathbb{E}_{\mu}[(\langle C, \xi \rangle - F(\xi)) \, \xi], \quad (D^2 V(C)) = \mathbb{E}_{\mu}[A(\xi)] = cte.$$

Ainsi, D^2V est clairement symétrique positive. Pour qu'elle soit définie, il faut que u appartienne à l'orthogonal de l'espace engendré par les ξ_k . V est donc strictement convexe si et seulement si $(\xi_k)_{1 \leq k \leq n}$ est génératrice de \mathbb{R}^d . Dans ce cas, V admet un unique minimum (explicite mais qui peut être long à calculer). Dans ce cas, une méthode récursive permettant de calculer (C_n) est

$$C_{n+1} = C_n - \gamma_{n+1} (\langle C_n, \xi_{n+1} \rangle - F(\xi_{n+1})) \xi_{n+1}$$

où (ξ_n) est une suite de v.a. i.i.d. de loi μ . Si on vérifie les hypothèses de Robbins-Monro, alors C_n converge vers l'unique minimum de V.

On étudie désormais le comportement dynamique de l'algorithme de Robbins-Monro lorsque le nombre de minimiseurs n'est plus éventuellement un singleton, mais un ensemble fini.

Corollaire 3.3.2 Sous les hypothèses du théorème (3.3.6), on suppose en plus que : $(\mathbf{H_{Fini}})$: h est continue et pour tout $v \ge 0$, $\{x, V(x) = v\} \cap \{\langle \nabla V, h \rangle = 0\}$ est fini. Alors, (X_n) converge vers X^{∞} p.s. fini et $\langle \nabla V, h \rangle (X_{\infty}) = 0$.

Preuve:

Structure de l'adhérence D'abord, comme $V(X_n) \xrightarrow{n \to +\infty} V_{\infty}$ p.s. fini et que $\lim V(x) = +\infty$ losrque $|x| \to +\infty$, on peut trouver $\tilde{\Omega} \subset \Omega$ de probabilité 1 tel que si $\omega \in \tilde{\Omega}$, alors $(X_n(\omega))_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite bornée. Notons χ^{∞} l'ensemble de ses valeurs d'adhérence (à ω fixé). Il s'agit d'un ensemble compact.

De plus, on peut se retreindre à des événements ω tels que $\Delta X_n \to 0$, ce qui va impliquer que χ^{∞} est également connexe. En effet, supposons que χ^{∞} ne soit pas connexe. Alors, il existe deux fermés non vides F_1 et F_2 d'intersection vide tels que $\chi^{\infty} = F_1 \cup F_2$ est inclus dans $F_1 \cup F_2$. Soit alors $x \in F^1 \cap \chi^{\infty}$ et $y \in F^2 \cap \chi^{\infty}$. Par définition de χ^{∞} , il existe des sous-suites $(X_{\phi_x(n)})$ et $(X_{\phi_y(n)})$ convergeant respectivement vers x et y. F_1 et F_2 étant des fermés d'intersection vide, on a $d(F_1, F_2) = d_0 > 0$. D'autre part, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tel que pour tout $n \ge n_0$,

$$|X_{\phi_x(n)} - x| \le \varepsilon$$
, $|X_{\phi_y(n)} - y| \le \varepsilon$ et $|X_n - X_{n-1}| \le \varepsilon$.

On fixe $\varepsilon = d_0/4$, on construit alors une suite d'instants (T_n^x) et (T_n^y) de la manière suivante :

$$T_1^x := \inf\{n \ge n_0, |X_n - x| \le d_0/4\}, \quad T_1^y := \inf\{n \ge T_1^x, |X_n - y| \le d_0/4\}$$

$$T_k^x := \inf\{n \ge T_{k-1}^y, |X_n - x| \le d_0/4\}, \quad T_k^y := \inf\{n \ge T_k^x, |X_n - y| \le d_0/4\}.$$

On a clairement T_k^x et T_k^y finis pour tout k car x et y sont valeurs d'adhérence. Comme $|X_n-X_{n-1}| \leq d_0/4$ pour tout $n \geq n_0$, on en déduit alors qu'entre les instants T_k^x et T_k^y , il existe un instant n_k tel que $d(X_{n_k}, F_1 \cup F_2) > d_0/4$. La suite (X_{n_k}) est bornée donc admet une valeur d'adhérence X_{∞} . Il est clair qu'alors, X_{∞} n'appartient pas à $F_1 \cup F_2$ donc n'appartient pas à $F_1 \cup F_2$ donc n'appartient pas à $F_2 \cup F_2$ donc n'appartient pas à $F_3 \cup F_2$

Convergence presque sûre On prend toutes les trajectoires telles que $V(X_n) \to V_{\infty}$, on a alors $\chi^{\infty}(\omega) \subset \{x, V(x) = V_{\infty}(\omega)\}$. Comme

$$\sum \gamma_k \langle \nabla V, h \rangle (X_k) < +\infty \quad p.s.,$$

on sait d'autre part que nécessairement

$$\chi^{\infty}(\omega) \subset \{\langle \nabla V, h \rangle = 0\}.$$

Démontrons que nécessairement il y a convergence de la suite (preuve en dimension 1 seulement car en dimension quelconque, les difficultés techniques sont assez importantes). On a deux cas. Soit $\chi^{\infty}(\omega)$ est réduit à un point et la preuve est terminée. Sinon, $\chi^{\infty}(\omega)$ est un intervalle (en tant que connexe de \mathbb{R}) d'intérieur non vide. En particulier, comme V est constante sur $\chi^{\infty}(\omega)$ et que V' est continue, V' = 0 sur $\chi^{\infty}(\omega)$. On a donc $\chi^{\infty}(\omega)$ inclus dans une composante connexe de $\{x, V(x) = V_{\infty}(\omega)\} \cap \{\langle \nabla V, h \rangle = 0\}$ qui est par hypothèse un ensemble localement fini. Ainsi, $\chi^{\infty}(\omega)$ est réduit à un point et le résultat suit.

Problème: Lorsque l'on est dans le cadre de Robbins-Monro, on sait qu'on converge vers la bonne cible. En revanche dans le cadre où la fonction h a plusieurs 0, l'algorithme converge-t-il vers des minimums locaux? Une tentative de réponse est proposée Section 3.4.

3.3.5 Théorème Limite Central pour les Algorithmes Stochastiques

Dans ce paragraphe volontairement raccourci (puisqu'aucune preuve n'y sera écrite), nous donnons une idée de la vitesse de convergence d'un algorithme stochastique. On donne ici une version lorsque h possède un unique zéro, i.e. lorsque l'on est dans le cadre de Robbins-Monro et on considère un algorithme stochastique ayant la forme suivante :

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1}H(X_n, U_{n+1}) = X_n - \gamma_{n+1}h(X_n) + \gamma_{n+1}\Delta M_{n+1}$$

où (U_n) est une suite de v.a. i.i.d., $h(x) = \mathbb{E}[H(x, U_1)]$ et

$$\Delta M_{n+1} = h(X_n) - H(X_n, U_{n+1}).$$

Théorème 3.3.7 Étant données les hypothèses du Corollaire 3.3.1 et h de classe C^2 qui a un unique zéro x^* fortement attractif pour l'ODE y = -h(y) (valeurs propres de la dérivée de h de partie réelle strictement positive). On suppose que

$$\exists \, \delta > 0$$
 $\sup_{n \ge 0} \mathbb{E}\left[|H(X_n, U_{n+1})|^{2+\delta} \right] < +\infty.$

et que le "bruit" ne soit pas trop dégénéré en x^* , i.e. que la matrice de covariance $\Sigma_H(x^*)$ de $H(x^*, U_1)$ définie par

$$\Sigma_H(x^*) = \mathbb{E}[(h(x^*) - H(x^*, U_1))(h(x^*) - H(x^*, U_1))^t]$$
 est définie positive.

Si enfin $(\gamma_n)_{n\geq 0}$ est de la forme

$$\gamma_n = \frac{\alpha}{\beta + n}, \quad pour \quad \alpha, \beta > 0$$

avec

$$\alpha > \frac{1}{2Re(\lambda_{\min})}.$$

Alors.

$$\sqrt{n}(X_n - x^*) \Longrightarrow \mathcal{N}(0, \alpha \Sigma)$$

avec

$$\Sigma = \int_0^{+\infty} (A_s)^t \Sigma_H(x^*) A_s ds \quad \text{et} \quad A_s = \exp(-(Dh(y^*) - \frac{I_d}{2\alpha})s).$$

Remarque 3.3.3 En dimension 1, $\lambda_{\min} = h'(y^*)$, $\Sigma_H(x^*) = \text{Var}(H(x^*, U_1), \text{ et } A_s = \exp(-Cs)$ avec $C = h'(y^*) - 1/(2\alpha)$. On en déduit que le résultat est correct si $\alpha > 1/(2h'(y^*))$ et que

$$\Sigma = \operatorname{Var}(H(x^*, U_1) \frac{\alpha^2}{2\alpha h'(x^*) - 1})$$

dont le minimum est atteint en

$$\alpha_{opt} = \frac{1}{h'(y^*)}.$$

3.4 La méthode de l'ODE

L'idée de cette section est de donner une description plus "dynamique" des algorithmes stochastiques.

3.4.1 Attracteurs d'ODE

On suppose h continue et on considère l'ODE :

$$\frac{dz}{dt} = -h(z(t)).$$

On note (z(t)) une solution de l'équation.

Définition 3.4.1 Un ensemble $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ est dit invariant pour l'ODE si z(0) appartient à Γ implique z(t) appartient à Gamma pour tout $t \ge 0$.

Définition 3.4.2 Soit z^* un zéro de h. Γ est une région d'attraction pour z^* si les propriétés suivantes sont satisfaites :

- Γ est invariant pour l'ODE.
- $-z(0) \in \Gamma implique$

$$\lim_{t \to +\infty} z(t) = z^*.$$

- Pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $\delta > 0$ tel que pour tout $z(0) \in \Gamma$ tel que $|z(0) - z^*| \leq \delta$ implique $|z(t) - z^*| \leq \varepsilon$ pour tout $t \geq 0$.

 z^* est alors dit asymptotiquement stable.

Proposition 3.4.1 Soit Γ un ensemble invariant pour l'ODE et z^* un zéro de h appartenant à $\bar{\Gamma}$. On suppose qu'il existe une fonction V de classe C^1 telle que

$$V(z^*)=0, \quad \text{et} \quad V(z)>0 \quad \forall z\neq z^*(z\in\Gamma).$$

$$\Gamma \quad \text{est born\'e ou} \quad \lim_{|z|\to+\infty}V(z)=+\infty.$$

$$\langle \nabla V,h\rangle(z)>0 \quad \forall z\in\bar{\Gamma} \text{ tel que } z\neq z^*.$$

Alors, Γ est une région d'attraction pour z^* .

Preuve: Nous allons vérifier les trois points successivement. Le premier point est évident. On pose $\phi(t) = V(z(t))$. On a $\phi'(t) = -\langle \nabla V, h \rangle(z(t))$ est positive et ϕ est donc décroissante. ϕ est donc majorée par $\phi(0)$. Comme $V(x) \to +\infty$ lorsque $|x| \to +\infty$, il suit que $|z(t)| \leq M$ et que (z(t)) est inclus dans Γ car il s'agit d'un ensemble invariant. On note $\phi_{\infty} = \lim \phi(t)$. On doit montrer que $\phi_{\infty} = 0$. On raisonne par l'absurde. Si $\phi_{\infty} > 0$, alors il existe $\rho > 0$, tel que pour tout t, $|z(t) - z^*| \geq \rho$. On note

$$A = \{z, |z| \le R, |z - z^*| \ge \rho\}.$$

A est compact et $\langle \nabla V, h \rangle$ est bornée sur A par une constante strictement négative -a. Ainsi, $\phi(t) \leq \phi(0) - at$ ce qui est impossible car ϕ est positive. Ainsi $z(t) \to z^*$.

Il reste maintenant le dernier point à vérifier. On fixe $\varepsilon > 0$ et on note

$$b = \inf\{V(z), z \in \bar{\Gamma}, V(z) \leqslant \beta, |z - z^*| \geqslant \varepsilon\}.$$

Comme $V(z^*)=0$, il existe $\delta>0$ tel que pour tout $z\in\Gamma\cap B(z^*,\delta),\ V(z)< b.$ Si z(0) appartient à cet ensemble, alors pour tout $t\geqslant 0,\ V(z(t))\leqslant V(z(0))< b.$ Ainsi, z(t) appartient A^c donc satisfait bien $|z(t)-z^*|\leqslant \varepsilon$.

Exemple 3.4.1 On prend la fonction h(z) = -z(1-z). On considère $V(z) = (1-z)^2$. Soit $\varepsilon > 0$. On a pour tout $t \in]\varepsilon, 1[$, V'(t)h(t) > 0 et V'(1)h(1) = 0. V(z) > 0 si $z \in [\varepsilon, 1[$. Il reste à voir que $\Gamma = [0,1]$ est invariant. z(t) est croissant car -h est positive. De plus, 1 est absorbant. Donc, Γ est bien invariant.

3.4.2 Interpolation du processus discret

On reprend un schéma d'algorithme stochastique sous sa forme initiale.

$$X_{n+1} = X_n - \gamma_{n+1}h(X_n) + \gamma_{n+1}(\Delta M_{n+1} + R_{n+1})$$

On fixe $\omega \in \Omega$ et on considère une trajectoire discrète ainsi obtenue : $x_n = X_n(\omega)$. On utilise alors le parallèle effectué en début de chapitre entre les schémas discrétisés et les équations différentielles.

Définition 3.4.3 (Processus interpolé) Étant donnée une première trajectoire discrète, on construit le processus continu noté $x^{(0)}$ vérifiant :

$$x^{(0)}(0) = 0$$
 et $x^{(0)}(\tau_n) = x^{(0)}(\gamma_1 + \dots + \gamma_n) = x_n.$

Puis on interpole entre chaque temps de discrétisation

$$\forall t \in [\tau_n, \tau_{n+1}] \qquad x^{(0)}(t) = x_n + (t - \tau_n) \left(-h(x_n) + \Delta M_{n+1} + R_{n+1} \right).$$

Plus simplement, $x^{(0)}$ est l'interpolation affine par morceaux aux points (τ_n, X_n) du processus discret. Ensuite, on note $x^{(n)}$ la fonction définie par l'opération de *shift* du temps τ_n :

$$\forall t \ge 0$$
 $x^{(n)}(t) = x^{(0)}(t + \tau_n).$

De la même façon, on définit $\sigma(t)$ le bruit interpolé dans l'approximation stochastique de l'ODE et $\sigma^{(n)}(t)$ la trajectoire du bruit shiftée de τ_n .

3.4.3 Théorème de Kushner-Clark

Le théorème fondateur sur le lien entre les équations différentielles, les algorithmes stochastiques et les systèmes dynamiques est le résultat suivant. Ce résultat a priori n'est pas tellement stochastique puisqu'il suppose en amont les bons controles des termes de reste (voir l'hypothèse (b)). Tout le jeu pour appliquer ce théorème revient ensuite à vérifier que ses hypothèses sont satisfaites.

Méthode de l'ODE

Définition 3.4.4 (Compteur d'itérations) Étant donné un temps T > 0 et un entier n, N(n,T) désigne le nombre d'itérations nécessaires pour parcourir un temps T à partir de τ_n . Ainsi

$$N(n,T) := \inf\{k \geqslant n, \gamma_n + \ldots + \gamma_{k+1} \geqslant T\}.$$

Théorème 3.4.1 (Théorème de Kushner-Clark) Supposons h continue, on fait les hypothèses suivantes :

- (a) (x_n) est une suite bornée.
- (b) Pour tout T > 0,

$$\lim_{n \to +\infty} \sup_{j \leqslant N(n,T)} \left| \sum_{k=n+1}^{j} \gamma_k (\Delta M_k + R_k) \right| = 0.$$

Alors on obtient les deux résultats

- i) La suite $(x^{(n)})_{n\geq 0}$ est relativement compacte pour la topologie de la convergence uniforme sur tout compact sur $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+,\mathbb{R}^d)$. De plus, toute valeur d'adhérence de cette suite est une solution de l'ODE.
- ii) Si Γ désigne une région d'attraction pour z^* et si (x_n) retourne infiniment souvent dans Γ , alors $x_n \to x^*$.

Preuve:

Point i) Cette partie est basée sur le théorème d'Ascoli : $((x^{(n)}(t))_{n\geq 0})$ est un ensemble de trajectoires bornées pour tout t car $(x_n)_{n\geq 0}$ l'est puisque

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \forall t \geqslant 0 \qquad \|x^{(n)}(t)\|_{\infty} \leqslant \sup_{k} |x_k| = \|x\|_{\infty}.$$

De plus, nous allons montrer que pour T > 0, la famille de trajectoires $(x_{t \in [0,T]}^{(n)})$ est équicontinue. Notons $||h||_{\infty} = \sup_{k \ge 0} |h(x_k)|$ qui est bien finie par continuité de h. On

considère alors deux temps s < t, alors quitte à négliger les termes de bord aux itérations N(n,s) et N(n,t), on a

$$|x^{(n)}(t) - x^{(n)}(s)| \approx \left| \sum_{k=N(n,s)+1}^{N(n,t)} \gamma_k (h(x_{k-1}) + \Delta(M_k + R_k)) \right|$$

$$\leq ||h||_{\infty} (t-s) + \left| \sum_{k=N(n,s)+1}^{N(n,t)} \gamma_k \Delta(M_k + R_k) \right|.$$

D'autre part, en utilisant la condition (b), on déduit facilement que

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \, \delta > 0 \quad \forall 0 \leqslant s \leqslant t \leqslant T \quad |s - t| \leqslant \delta \quad \forall n \geqslant 0 \quad |x^{(n)}(t) - x^{(n)}(s)| \leqslant \varepsilon.$$

La famille $(x^{(n)})_{n\geq 0}$ satisfait donc les hypothèses du théorème d'Ascoli : elle est relativement compacte.

Introduisons maintenant le processus constant par morceaux défini par

$$\bar{x}(t) = x_n \forall t \in [\tau_n, \tau_{n+1}].$$

Avec cette définition, il est facile de voir que

$$x^{(n)}(t) = x^{(n)}(0) - \int_0^t h(\bar{x}(\tau_n + s))ds + \sigma^{(n)}(t).$$
 (3.10)

De part la définition de $x^{(n)}$ et \bar{x} , on voit immédiatement que comme $(x^{(n)})_{n\geq 0}$ est une famille équicontinue de trajectoires sur [0,T], alors

$$\forall \alpha > 0 \quad \exists \beta > 0 \quad \gamma_n < \beta \Longrightarrow \sup_{t \in [0,T]} |x^{(n)}(t) - \bar{x}(\tau_n + t)| \leqslant \alpha.$$

On re-écrit alors (3.10) en

$$x^{(n)}(t) = x^{(n)}(0) - \int_0^t h(x^{(n)}(s))ds + \sigma_1^{(n)}(t),$$

avec

$$\sigma_1^{(n)}(t) := \sigma^{(n)}(t) + \int_0^t [h(x^{(n)}(s)) - h(\bar{x}(\tau_n + s))] ds.$$

On constate que $\sigma_1^{(n)}$ tend vers 0 uniformément sur [0,T] d'après la remarque précédente et l'hypothèse (b). Par conséquent, toute valeur d'adhérence x^{∞} de $x^{(n)}$ est solution de l'équation différentielle :

$$x^{\infty}(t) = x^{\infty}(0) - \int_0^t h(x^{\infty})(s)ds$$

Point ii) <u>Étape 1</u>: On montre qu'il existe une sous-suite de $(x_n)_{n\geqslant 0}$ qui converge vers x^* . On sait $\overline{\text{que }(x_n)_{n\geqslant 0}}$ revient infiniment souvent dans Γ , donc on peut construire une sous-suite (x_{u_n}) telle que $x_{u_n} \in \Gamma$ pour tout n. D'après le point i), à une seconde extraction près, on peut supposer que $(x^{(u_n)})_{n\geqslant 0}$ converge vers une solution de l'ODE. Notons ϕ une telle trajectoire limite. Comme x^* est asymptotiquement stable, on en déduit que

$$\lim_{t \to +\infty} \phi(t) = x^*.$$

Il reste désormais à voir que l'on peut aller assez loin en t pour que $(x_{u_n})_{n\geqslant 0}$ se rapproche de x^* aussi près qu'on le souhaite. Fixons $\varepsilon>0$ et T tel que pour tout $t\geqslant T$ $|\phi(t)-x^*|\leqslant \varepsilon/2$. Pour k assez grand, et $n\geqslant k$:

$$|x_{u_n} - x^*| = |x^{(u_n)}(0) - x^*| \le \varepsilon/2 = |x^{(u_k)}(\tau_{u_n} - \tau_{u_k}) - x^*|.$$

On choisit ensuite k assez grand pour que la trajectoire $x^{(u_k)}$ soit proche de ϕ , et n assez grand pour que $\tau_{u_n} - \tau_{u_k} > T$. Ainsi, pour tout ε , il existe donc un entier n_0 au delà duquel $|x_{u_n} - x^*| \leq \varepsilon$ d'où le résultat.

<u>Étape 2</u>: On va montrer par l'absurde que $x_n \to x^*$. Si ce n'était pas le cas, il existerait $\alpha > 0$ et une sous-suite (w_n) telle que

$$\forall n \in \mathbb{N} \qquad |x_{w_n} - x^*| \geqslant \alpha.$$

Comme Γ est une région d'attraction, on sait que pour le choix de $\epsilon = \alpha/2$, il existe δ tel que si ϕ est une solution de l'ODE, alors

$$|x(0) - x^*| \le \delta$$
 \Longrightarrow $\forall t \ge 0.$ $|x(t) - x^*| \le \epsilon.$

Supposons donc choisi un tel δ , on peut construire la suite d'instants définis par :

$$\begin{split} &l_0 = \inf\{n, |x_n - x^*| \leq \delta\}, \\ &m_1 = \inf\{n \geq l_0, |x_n - x^*| \geq \alpha\}, \\ &n_1 = \sup\{n \in \mathbb{N}, |x_n - x^*| \leq \delta \quad \text{et} \quad n \leq m_1\} \\ &\vdots, \\ &l_{k+1} = \inf\{n \geq m_k, |x_n - x^*| \leq \delta\} \\ &m_{k+1} = \inf\{n \geq l_{k+1}, |x_n - x^*| \geq \alpha\} \\ &n_{k+1} = \sup\{n \leq m_{k+1}, |x_n - x^*| \leq \delta\} \end{split}$$

Comme $(x^{(n_k)})_{k\geqslant 1}$ est relativement compacte, il existe $\psi: \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ strictement croissante telle que $(x^{(n_{\psi(k)})})$ converge vers une solution ϕ de l'ODE. On sait en plus que

$$\forall k \in \mathbb{N} \qquad |x^{(n_{\psi(k)})}(0) - x^*| = |x_{n_{\psi(k)}} - x^*| \le \delta.$$

Nécessairement, ce la implique que $|\phi(0) - x^*| \le \delta$ et en fin de compte :

$$\forall t \geqslant 0 \qquad |\phi(t) - x^*| \leqslant \epsilon.$$

Or, on sait que $x^{(n_{\psi(k)})}$ converge sur tout compact vers ϕ . Choisissons T > 0 et K_1 assez grand pour que tel que

$$\forall k \geqslant K_1$$

$$\sup_{t \leqslant 2T} |x^{(n_{\psi(k)})}(t) - \phi(t)| \leqslant \frac{2\alpha}{3}.$$

Comme on sait que $x_{m_{\psi(k)}} \notin B(x^*, \alpha)$ et que $x_{m_{\psi(k)}} = x^{(n_{\psi(k)})} (\tau_{m_{\psi(k)}} - \tau_{n_{\psi(k)}})$, on en déduit alors que nécessairement le temps $\tau_{m_{\psi(k)}} - \tau_{n_{\psi(k)}} > 2T$.

Mais la suite $(\gamma_n)_{n\geq 0}$ tend vers 0 donc en fait on peut trouver un entier $K_2 \geq K_1$ tel que

$$\forall k \geqslant K_2 \qquad \tau_{m_{\psi(k)}-1} - \tau_{n_{\psi(k)}} \geqslant T.$$

Ainsi, si on considère un temps s dans l'intervalle]0,T], alors $\tau_{n_{\psi(k)}+1}+s<\tau_{m_{\psi(k)}-1}$ et la trajectoire $x^{(n_{\psi(k)})}(s)$ n'est pas encore sortie de la boule $B(x^*,\alpha)$ et n'est pas encore rentrée dans la boule $B(x^*,\delta)$. On passe alors à la limite en k en utilisant à nouveau la convergence uniforme sur [0,2T] et obtenir ainsi une contradiction puisque dans ce cas :

$$\delta < |x^* - \phi(s)| \leqslant \alpha.$$

Ceci conclut la preuve.

Vérifier les hypothèses du théorème de Kushner & Clark En fin de compte, pour appliquer le théorème précédent, il s'agit de savoir démontrer, étant donnée une martingale $(M_n)_{n\geqslant 0}$, sous quelles hypothèses on peut obtenir

$$\lim_{n \to +\infty} \sup_{j \leqslant N(n,T)} \left| \sum_{k=n+1}^{j} \gamma_k \Delta M_k \right| = 0 \quad p.s.$$
 (3.11)

La proposition suivante fournit des éléments de réponse.

Proposition 3.4.2 (Métivier-Priouret) On considère $(M_n)_{n\geq 0}$ une martingale de carré intégrable ainsi qu'une suite de pas $(\gamma_n)_{n\geq 0}$ vérifiant $\sum \gamma_n = \infty$. Alors, si

$$\sum_{n\geqslant 1}\gamma_n^2\mathbb{E}[|\Delta M_n|^2]<+\infty,$$

la condition (3.11) est satisfaite.

Remarque 3.4.1 Il s'agit d'un résultat généralisable à une martingale de q-moment intégrable (La condition sur les pas est alors moins contraignante).

<u>Preuve</u>: Admis, on consultera par exemple le [BMP90]. L'idée est d'utiliser (par exemple) l'inégalité BDG.

3.5 Extensions

Les exemples suivants pourront être considérés lors d'une étude personnelle puis faire l'objet d'un petit travail de synthèse exposé en fin de cours. Les études proposées ici sont loin d'être aussi guidées que ce qui est proposé pour les chaines de Markov. Il est possible de présenter des éléments de simulation tout comme des études purement théoriques.

3.5.1 Problème du Bandits multi-bras

Le célébrissime cadre du bandit multi-bras est sans doute le problème le plus étudié en apprentissage statistique par le biais d'algorithmes stochastiques.

A - Bibliographie Voici des indications bibliographiques.

[CGM+12] O. CAPPÉ, A. GARIVIER, O-A. MAILLARD, R. MUNOS, G. STOLTZ Kullback-Leibler Upper Confidence Bounds for Optimal Sequential Allocation.

[LR85] Lai, T.L. Robbins, H. Asymptotically efficient adaptive allocation rules. Advances in applied mathematics, 6 (1): 4, 1985.

[LPT04] D. LAMBERTON, G. PAGÈS, P. TARRÈS When can the two-armed bandit algorithm be trusted? Annals of Applied Probability, Vol. 14, No. 3, 1424?1454, 2004.

[SN69] SHAPIRO, I. J., NARENDRA, K. S. Use of stochastic automata for parameter self-optimization with multi-modal performance criteria. IEEE Trans. Syst. Sci. Cybern. SSC-5 352 ?360, 1969.

B - Modèle L'algorithme du bandit à 2 bras (ou plus généralement à d bras) est un algorithme d'apprentissage dont l'objectif est de détecter parmi 2 sources A et B laquelle est la plus profitable. Cet algorithme a été initialement introduit par Norman en psychologie mathématique puis développé par Shapiro et Narendra en automatique. Son principe est simple. A chaque temps, on tire au sort une des sources (ou un des bras) puis l'on teste cette source (machine, médicament, trader...). Si le résultat apporté par ce bras est satisfaisant, on favorise ce bras, sinon, on ne fait rien. Plus précisément, il est défini de la manière suivante. On considère 2 sources et des suites d'évènements (A_n) et (B_n) où

 $A_n = \{ \text{le résultat de la source } A \text{ est satisfaisant.} \}$

et

 $B_n = \{ \text{le résultat de la source } B \text{ est satisfaisant.} \}.$

On pourra proposer un cadre de modélisation non trivial où peut intervenir ce modèle de localisation de bras optimal. On pourra également penser à étendre le problème à une situation comportant plusieurs bras.

C - Algorithme stochastique Cette partie aborde une méthode algorithmique probabiliste. On pourra s'intéresser à la formalisation de l'algorithme de Narendra et Shapiro en terme d'algorithme stochastique, et étudier sa convergence ainsi que son implémentation numérique. Par ailleurs, on pourra mettre à profit l'approche dite de l'ODE dans ce contexte

Enfin, une question fondamentale concerne le fait d'évaluer la probabilité que l'algorithme de Narendra échoue. On pourra étudier cette question au vue des travaux [LPT04] (par exemple).

D - Optimalité et regret Une question de nature un petit peu différente de théorie des jeux et statistique concerne l'étude de l'optimalité de stratégie algorithmique, et ce à horizon fini. Plus précisément, on ne s'intéresse plus totalement à la situation où on peut actionner le bandit n fois avec $n \mapsto +\infty$.

On pourra s'interesser à la notion de « Regret » dans les problèmes de bandit et proposer un aménagement de la modélisation décrite dans B. Ensuite, on pourra étudier une méthode statistique garantissant une optimalité du regret, par exemple en s'inspirant de [CGM+12] et des références données dans ce travail.

3.5.2 Réduction de variance par échantillonnage préférentiel

Le problème de l'échantillonnage préférentiel est aussi appelé *importance sampling* en anglais et correspond à une méthode de type MCMC d'estimation statistique. Sa justification, elle, est par essence probabiliste.

A - Bibliographie Voici quelques ouvrages qui couvrent l'essentiel.

[C02] H.F. Chen Stochastic approximation and its applications. Kluwer Academic Publisher, 2002.

[CLG88] H.F. CHEN, G. LEI, A.J. GAO Convergence and robustness of the Robbins-Monro algorithm truncated at randomly varying bounds. Stochastic Process. Appl. 27 217?231, 1988.

[RC04] C. ROBERT, G. CASELLA *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer-Verlag, second edition edition, 2004.

[LP10] V. Lemaire, G. Pagès *Unconstrained recursive importance sampling*. Ann. Appl. Probab., 20(3):1029-1067, 2010.

B - Modèle Le principe général de la réduction de variance dans une méthode de Monte-Carlo est d'estimer l'espérance d'une variable aléatoire Z, notée $\mathbb{E}[\Phi(Z)]$, par la loi des grans nombres et limiter dans celui-ci les effets de la variance de simulation.

Ce problème trouve ses premières applications dans la détermination précise de la valeur d'un quantile pour une loi de probabilités uni-dimensionnelle. Ainsi, on se donne une suite de réalisations $(X_1, \ldots X_n, \ldots)$ de variables aléatoires, indépendantes et identiquement distribuées, de densité f et de fonction de répartition F. On cherche à estimer, étant donné un nombre $\alpha \in]0;1[$ quelconque, le réel q tel que

$$\int_{-\infty}^{q} f(t)dt = \alpha.$$

On pourra commencer par expliquer en quoi ce problème se ramène au problème initialement évoqué. De même, on pourra rechercher d'autres situations de modélisation faisant apparaître un problème d'échantillonnage préférentiel.

C - Algorithme Stochastique - Théorique et Numérique On se propose d'utiliser le schéma pour la détermination du quantile un schéma

$$\hat{q}_{n+1} = \hat{q}_n - \gamma_{n+1} \left[\chi_{X_{n+1} \leqslant \hat{q}_n} - \alpha \right]$$

On pourra démontrer que la suite \hat{q}_n converge presque sûrement vers q et illustrer ce résultat par des simulations numériques.

En finance, lorsque X est une variable aléatoire quantifiant la perte de valeur d'un portefeuille entre un temps t et un temps $t + \Delta_t (-(V_{t+\Delta_t} - V_t))$, le quantile q_{α} est appelé

la Value At Risk. On la note $V@R_{\alpha}(X)$. Cette quantité est utilisée pour mesurer le risque d'un marché. Le lecteur, si intéressé, pourra se documenter sur les impacts de ce modèle et discuter de certaines (simples) généralisations.

D - Modélisation et Théorique L'idée générale de l'échantillonage préférentiel est basée sur l'identité suivante : soit X de densité p par rapport à la mesure de Lebesgue et (p_{θ}) une famille de densités sur \mathbb{R}^d . Alors,

$$\mathbb{E}\left[f(X)\right] = \int f(x)p(x)\lambda_d(dx) = \int \frac{f(x)p(x)}{p_{\theta}(x)}p_{\theta}(x)\lambda_d(dx) = \mathbb{E}\left[\frac{f(X^{(\theta)})p(X^{(\theta)})}{p_{\theta}(X^{(\theta)})}\right]$$

où $X^{(\theta)}$ a pour loi $p_{\theta}(dx)$.

La réduction de variance dans ce cadre consiste donc à minimiser la fonction de variance d'estimation dans l'expression précédente. On pourra chercher à formaliser ce problème dans un cadre d'algorithme du type Robbins-Monro. En particulier, on étudiera la situation où la famille de lois p_{θ} est un shift de la distribution initiale :

$$\pi_{\theta}(dx) = p(x - \theta)dx.$$

Enfin, on pourra démontrer un théorème général en s'inspirant de [RC04] qui donne en toute généralité la méthode optimale d'échantillonnage préférentiel en sortant du cadre de modèles paramétriques $(p_{\theta})_{\theta \in \Theta}$.

 ${\bf E}$ - Algorithme Stochastique - Théorique On pourrait étudier spécifiquement le cas gaussien, i.e. le cas où

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \exp(-|x|^2/2) dx,$$

lorsque les lois utilisées sont des densités gaussiennes shiftées de θ . On pourra calculer explicitement la variance associée au choix θ notée $V(\theta)$ et étudier ses propriétés de régularité en θ , convexité, ..., ainsi que calculer à profit son gradient en la variable θ .

Puis, on s'intéressera à la dérivation d'un algorithme stochastique de type Robbins-Monro pour minimiser la fonction V de la forme :

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1} H(\theta_n, \xi_{n+1}),$$

où (ξ_n) est une suite de v.a. i.i.d. de loi $\mathcal{N}(0,I_d)$ et $H(\theta,z)$ une fonction à déterminer. Que penser de l'applicabilité du théorème de Robbins-Monro dans ce cas (hypothèse sur V)?

- **F Algorithme Stochastique Théorique et Numérique** L'algorithme précédent ne semble pas exploitable, on peut alors proposer des alternatives pour le faire « converger ».
 - On pourra se documenter sur les méthodes dites « Projections à la Chen » documentées, entre autres, dans [CLG88] et [C02]. L'idée est d'obliger l'algorithme à rester dans un compact pour éviter l'explosion. Le problème de cet algorithme est qu'il met beaucoup de temps à se stabiliser. Il serait intéressant d'illustrer ce phénomène numériquement et de démontrer la validité d'une telle méthode de projection.

 Un second changement de variable décrit complètement dans [LP10] permet de contourner les problèmes de stabilisation des projections précédentes. On pourra s'intéresser aux éléments théoriques sous-jacents et expérimenter la stratégie numériquement.

3.5.3 Moindres carrés récursifs & co

Le cadre de cette application est l'inférence de modèles linéaires. Notons qu'un problème un peu similaire consiste à étudier les problèmes de « tracking » de trajectoires. On peut également s'intéresser dans ce contexte à l'inférence de modèles auto-régressifs (AR).

A - Bibliographie Une liste non exhaustive :

[BMP90] A. BENVENISTE, M. MÉTIVIER, P. PRIOURET Adaptive algorithms and stochastic approximations. Springer Verlag, Applications of Mathematics, vol. 22, Berlin, Heidelberg, New York, 1990 (also available in French, Masson 1987).

[D97] M. Duflo Random Iterative Models. Springer Verlag, New-York, 1997.

[KY03] H. Kushner, G. Yin Stochastic approximation and recursive algorithms and applications. Second edition. Applications of Mathematics, 35. Stochastic Modelling and Applied Probability. Springer-Verlag, New York, 2003.

 ${\bf B}$ - Modèle Le modèle de base fait appel au modèle linéaire. Il peut être question d'estimer θ dans la relation

$$X_{n+1} = \theta^t \psi_n + \epsilon_{n+1},$$

et ceci de manière récursive lorsque les observations arrivent successivement et qu'on observe $(\psi_n, X_{n+1})_{n\geq 0}$ et que le bruit $(\epsilon_n)_{n\geq 0}$ est centré de covariance Γ . On consultera le début du chapitre 5 de [D97] pour une liste de motivation sur ce problème d'estimation/prédiction/suivi de trajectoire. Puis, on pourra par exemple étudier le cas particulier du modèle auto-régressif d'ordre p en le formalisant comme précédemment.

C - Cas particulier des moindres carrés répulsifs - Théorique Si on étudie le « sous-cas » où on cherche à modéliser une relation entrée/sortie pour approcher une relation $\xi \to F(\xi)$ de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R} par une relation de la forme

$$\xi \to \sum_{i=1}^{d} c_i \xi_i = {}^{t}C\xi \simeq F(\xi).$$

Ici, $C = (c_i)_{i \in \{1,\dots,d\}}$) et on peut reparamétrer le problème de la manière suivante. On commence par faire des observations de la réponse $F(\xi)$ sur N entrées que l'on note ξ^1,\dots,ξ^N ($\forall k \in \{1,\dots,N\}, \xi^k = (\xi_1^k,\dots,\xi_d^k)$). Le but est ensuite de faire une minimisation au sens des moindres carrés, i.e. de minimiser la fonction

$$L(C) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} (F(\xi^{k}) - {}^{t}C\xi^{k})^{2}.$$

Après le calcul de ∇L et de sa Hessienne, on montrera que D^2L est une matrice symétrique positive et définie si et seulement si $(\xi^k)_{\{1 \le k \le N\}}$ est une famille génératrice de \mathbb{R}^d . Dans le

cas où $(\xi^k)_{\{1 \leq k \leq N\}}$ est une famille génératrice de \mathbb{R}^d , montrer qu'alors, L admet un unique minimum atteint en un point C^* dont on donnera une expression explicite.

Dans le contexte de grande dimension, le calcul explicite de C^* peut parfois nécessiter un temps de calcul important. C'est pourquoi une alternative consiste à implanter un algorithme stochastique de recherche de C^* . On propose l'algorithme suivant :

- Initialisation avec un vecteur déterministe $C_0 \in \mathbb{R}^d$
- Pour tout $n \ge 0$:

$$C_{n+1} = C_n - \gamma_{n+1} \left({}^t C_n Z_{n+1} - F(Z_{n+1}) \right) Z_{n+1}$$

où (Z_n) est une suite de v.a. i.i.d à valeurs dans \mathbb{R}^d de loi uniforme sur $\{\xi^1,\ldots,\xi^N\}$, i.e. $\mathbb{P}(Z_1=\xi^k)=1/N$ pour tout $k\in\{1,\ldots,N\}$.

On se place dans les conditions habituelles : (γ_n) est une suite de pas décroissante satisfaisant les conditions

$$\sum \gamma_n = +\infty$$
 et $\sum \gamma_n^2 < +\infty$.

- 1. Montrer que $\mathbb{E}[C_n C_{n+1} | \mathcal{F}_n] = \gamma_{n+1} h(C_n)$ où h est une fonction que l'on déterminera et en déduire la convergence de $(C_n)_{n \ge 0}$.
- 2. Expérimenter numériquement une telle méthode d'approximation semble tout à fait réalisable!
- 3. Est-il possible d'étendre une telle méthode aux analyses en composantes principales?

D - Application des algorithmes stochastiques aux modèles AR On s'inspirera de la présentation effectuée du problème dans [D97] partie 5.2 du chapitre 5, ou bien des paragraphes 2.4.3.3 et 2.7.6 de [BMP90] pour présenter une application des algorithmes stochastiques au contexte des modèles linéaires récursifs, notamment dans le contexte des processus auto-regressifs. Une mise au propre du problème et d'une solution possible semble déjà quelque chose de tout à fait acceptable.

Chapitre 4

Introductions aux méthodes bayésiennes

Nous présentons dans ce chapitre quelques éléments probabilistes ayant des applications en statistiques bayésiennes.

4.1 Paradigme Bayésien

4.1.1 Modèle Statistique

Définition 4.1.1 (Modèle) On se place dans un espace probabilisé paramétrique classique : on considère un espace probabilisé $(\mathcal{X}, \mathcal{B}, (\mathbb{P}_{\theta})_{\theta \in \Theta})$ et les données observées sont X.

Le but de l'analyse statistique est de faire de l'inférence sur , c'est-à-dire décrire un phénomène passé ou à venir dans un cadre probabiliste. L'idée centrale de l'analyse bayésienne est de considérer le paramètre inconnu θ comme aléatoire : l'espace des paramètres Θ est muni d'une probabilité π tel que (Θ, A, π) est un espace probabilisé.

Nous noterons $\theta \sim \pi$. π est appelée loi **a priori**. Intuitivement et en termes informationnels, elle détermine ce qu'on sait et ce qu'on ne sait pas avant d'observer X.

Définition 4.1.2 (Modèle dominé) Le modèle est dit dominé s'il existe une mesure commune dominante μ , c'est- à-dire pour tout θ , \mathbb{P}_{θ} admet une densité par rapport à μ :

$$p(X|\theta) = p_{\theta}(X) = \frac{d\mathbb{P}_{\theta}}{d\mu}(X).$$

Cette fonction $p(X|\theta) = p_{\theta}(X)$, vue comme une fonction de θ une fois qu'on a observé un tirage de X, est appelée vraisemblance du modèle. C'est la loi de X conditionnellement à θ .

4.1.2 Loi a posteriori

Définition 4.1.3 (Loi a posteriori) Dans le cas d'un modèle dominé, la loi jointe de (X, θ) s'écrit

$$\lambda_{\pi}(X,\theta) = p(X|\theta)d\pi(\theta) = p(X|\theta)\pi(\theta)d\nu(\theta),$$

la dernière égalité étant valable dans le cas où l'a priori π est absolument continu par rapport à ν , la mesure de Lebesgue sur Θ . La loi a posteriori est définie par sa densité :

$$d\pi(\theta|X) = \frac{f(X|\theta)\pi(\theta)}{\int_{\Theta} f(X|\alpha)\pi(\alpha)d\nu(\alpha)}$$
(4.1)

La quantité m_{π} définie par

$$m_{\pi}(X) := \int_{\Theta} f(X|\theta) d\pi(\theta),$$

est la loi marginale de X et est une constante de normalisation de la loi a posteriori, indépendante de θ .

Nous travaillerons donc très régulièrement à une constante multiplicative près :

$$\pi(\theta|X) \propto p(X|\theta)\pi(\theta)$$
.

Nous ajoutons que par construction la loi a posteriori est absolument continue par rapport à la loi a priori et bien sûr, la loi a posteriori est une mesure aléatoire sur Θ dépendant des observations X relevées.

Exemple 4.1.1 (Loi gaussienne) Voici un petit exemple concernant la loi gaussienne : on se donne une famille $(\mathbb{P}_{\theta})_{\theta \in \Theta}$ où θ indexe la moyenne d'une loi gaussienne de variance connue σ^2 . Ainsi, $\mathbb{P}_{\theta} = \mathcal{N}(\theta, \sigma^2)$, et on munit $\Theta = \mathbb{R}$ de la loi a priori gaussienne

$$\pi(\theta) = \frac{e^{-\frac{\theta^2}{2\tau^2}}}{\sqrt{2\pi}\tau}.$$

On s'intéresse alors à la loi a posteriori lorsqu'on observe n données (X_1, \ldots, X_n) . On note $\theta_0 = \mathbb{E}X$ qui est inconnu, et qu'on cherche à estimer. La loi de θ conditionnellement aux n observations (X_1, \ldots, X_n) est

$$\pi_n(\theta|X) \propto \left(\prod_{j=1}^n e^{-\frac{(X_j-\theta)^2}{2\sigma^2}}\right) \times e^{-\frac{\theta^2}{2\tau^2}}$$

Un rapide calcul montre alors qu'en réalité :

$$\pi_n(\theta|X) \propto e^{-n\frac{(\bar{X}_n-\theta)^2}{2\sigma^2}} \times e^{-\frac{\theta^2}{2\tau^2}},$$

où \bar{X}_n est la moyenne empirique des échantillons. Un dernier calcul aboutit à

$$\pi_n(\theta|X) = \mathcal{N}\left(\bar{X}_n \frac{\tau^2}{\tau^2 + \sigma^2/n}, \frac{\sigma^2/n}{\sigma^2/n + \tau^2}\right).$$

Remarque 4.1.1 (Consistance de l'a posteriori) Cet exemple est instructif puisqu'il donne une information importante : lorsque n grandit et tend vers $+\infty$, la mesure a posteriori se concentre autour de \bar{X}_n avec une variance en σ^2/n , et ce, quel que soit τ , σ ou θ_0 . Ainsi, la mesure a posteriori sur θ qui est dérivée d'un a priori arbitraire sur la moyenne de X se concentre vers le bon θ_0 à vitesse \sqrt{n} au sens où la masse de l'a posteriori à l'extérieur d'une boule $B(\theta_0, \sqrt{n})$ tend vers 0 presque sûrement :

$$\pi_n\left(B(\theta_0,\sqrt{n})^c|X_1,\ldots,X_n\right)\longrightarrow 0 \quad lorsque \quad n\longrightarrow +\infty.$$

4.2 Consistance bayésienne

Cette dernière remarque est fondamentale pour la suite de ce chapitre et justifie (à mon sens) l'utilisation de méthodes d'estimations bayésiennes puisque celles-ci sont validées au sens fréquentiste lorsque le nombre d'observations grandit.

4.2.1 Formulation du résultat

Les références historiques importantes sur ces questions de consistance bayésienne sont assez anciennes pour les situations paramétriques.

[IK79] I. A. IBRAGIMOV, R. Z. KHASMINSKII, Statistical estimation: asymptotic theory; translated by Samuel Kotz, New York: Springer-Verlag, 1979.

[IC86] L. LE CAM, Asymptotic Methods in Statistical Decision Theory, Springer, 1986.

[S65] L. Schwartz, On Bayes procedure. Z. Wahrscheinlichkeitstheorie, No. 4, pp. 10-26, 1965.

D'autres sont plus récentes dans les situations où Θ n'est plus un espace paramétrique mais de dimension « infinie ».

[GGvdW00] S. GHOSAL, J. K. GHOSH, A.W. VAN DER VAART, Convergence rates of posterior distributions, The Annals of Statistics, Volume 28, Number 2, 2000.

[WLP07] S. G. WALKER, A. LIJOI AND I. PRUNSTER, On rates of convergence for posterior distributions in infinite dimensional models, The Annals of Statistics, Vol. 35, No. 2, 738-746, 2007.

Les résultats de consistance bayésienne s'expriment en général tous sous la forme suivante : on définit une boule autour de θ_0 de rayon ϵ_n au sens d'une métrique sur les lois de probabilités :

$$B_d(\theta_0, \epsilon_n) := \{ \theta \in \Theta \mid d(\mathbb{P}_{\theta}, \mathbb{P}_{\theta_0}) \leqslant \epsilon_n \}.$$

Pour cette boule, on obtient alors en général des résultats sous la forme :

$$\pi_n (B_d(\theta_0, \epsilon_n)) \longrightarrow 1 \quad p.s. \quad \text{lorsque} \quad n \longrightarrow +\infty.$$

Ainsi, les résultats concernent avant tout des lois de probabilités \mathbb{P}_{θ} et non les paramètres eux-mêmes. Par ailleurs, la distance joue un rôle fondamental et la plupart du temps, c'est la distance au sens de Kullback qui est utilisée. Enfin, la vitesse de contraction est quantifiée par la vitesse de décroissance de $(\epsilon_n)_{n\in\mathbb{N}}$ lorsque n tend vers $+\infty$.

4.2.2 Cas où Θ est fini

Comme toujours, c'est souvent le cas en apparence le plus simple qui est le plus informatif. Revenons tout d'abord à la nature de la loi *a posteriori*. En réalité, il est facile de voir que cette loi *a posteriori* suit une Markovienne. En effet, notons $(X_1, \ldots, X_n, \ldots)$ une suite de v.a. i.i.d. de loi \mathbb{P}_{θ_0} , où θ_0 est inconnu.

A l'instant 0, la loi a posteriori est indépendante des observations, et donc

$$\pi_0 = \mu$$
 la loi a priori.

À l'instant n+1, la loi *a posteriori* se déduit de la loi *a posteriori* π_{n-1} en utilisant la formule de Bayes :

$$\forall \theta \in \Theta \qquad \pi_n(\theta) = \frac{\pi_{n-1}(\theta) \mathbb{P}_{\theta}(X_n)}{\sum_{\theta \in \Theta} \pi_{n-1}(\alpha) \mathbb{P}_{\alpha}(X_n)}.$$
 (4.2)

La formulation précédente de la structure markovienne de l'a posteriori est une représentation « création - annihilation » qu'on retrouve dans de nombreuses méthodes stochastiques. On consultera à profit

[DM04] P. Del Moral Feynman-Kac Formulae, Springer, New-York, 2004.

Définition 4.2.1 (Identifiabilité) On dit que le modèle est identifiable si l'application $\theta \mapsto \mathbb{P}_{\theta}$ est injective. On supposera le modèle identifiable par la suite.

On peut par exemple quantifier l'identifiabilité du modèle au travers de l'utilisation de distances sur les lois de probabilités. Il en existe un nombre important : distance en variation totale, ditance de Hellinger, divergence de Kullback (ou entropie) pour les plus célèbres. Par la suite, nous formaliserons les choses proprement en utilisant la distance de Hellinger (ce choix est un peu arbitraire et des résultats peuvent également être obtenus en utilisant d'autres métriques).

Définition 4.2.2 (Distance de Hellinger) $Si \mathbb{P}_1$ et \mathbb{P}_2 sont deux lois de probabilités sur un espace E, absolument continues l'une par rapport à l'autre, on définit

$$d_H^2(\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2) := \int_E \left(\sqrt{d\mathbb{P}_1(x)} - \sqrt{d\mathbb{P}_2(x)} \right)^2 = \int_E \left(\sqrt{\frac{d\mathbb{P}_2(x)}{d\mathbb{P}_1(x)}} - 1 \right)^2 d\mathbb{P}_1(x).$$

On pourra vérifier les faits suivants.

Proposition 4.2.1 (Propriétés de la distance de Hellinger) Les points suivants sont satisfaits :

- i) d_H est une distance (tous les axiomes sont vérifiés).
- ii) Elle est d'ailleurs non tributaire de la mesure de référence qui pourrait servir à la définir si μ est une mesure telle que \mathbb{P}_1 et \mathbb{P}_2 sont absolument continues par rapport à μ .
 - iii) La distance de Hellinger est toujours majorée par $\sqrt{2}$.
 - iv) On a la relation avec la distance en variation totale :

$$\frac{1}{2}d_H^2(\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2) \leqslant d_{VT}(\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2) \leqslant d_H(\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2)$$

v) On a la relation avec l'entropie :

$$2d_H^2(\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2) \leqslant d_{KL}(\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2).$$

Cette distance permet alors de quantifier le résultat de consistance bayésienne lorsque Θ est fini et le modèle identifiable.

Théorème 4.2.1 (Consistance bayésienne) Supposons que le modèle est identifiable avec

$$\forall \theta \neq \theta_0 \qquad d_H^2(\theta, \theta_0) \geqslant h^2 > 0,$$

alors la loi a posteriori se concentre exponentiellement vite vers δ_{θ_0} si $\pi(\theta_0) > 0$.

<u>Preuve</u>: On note π_n l'a posteriori à l'étape n. Puisque $\pi(\theta_0) > 0$, on constate immédiatement que $\pi_n(\theta_0) > 0$ pour tout entier n. On peut alors étudier la quantité suivante :

$$\forall \theta \in \Theta \qquad \frac{\pi_n(\theta)}{\pi_n(\theta_0)} = \frac{\pi_{n-1}(\theta)}{\pi_{n-1}(\theta_0)} \times \frac{\mathbb{P}_{\theta}(X_n)}{\mathbb{P}_{\theta_0}(X_n)}.$$

Si l'on définit le rapport de vraisemblance de la *n*-ième observation

$$\Lambda_n(\theta) := \frac{\mathbb{P}_{\theta}(X_n)}{\mathbb{P}_{\theta_0}(X_n)},$$

ainsi que $\mathcal{F}_n = \sigma(X_1, \dots, X_n)$ on constate alors que

$$\mathbb{E}\left[\Lambda_n(\theta)|\mathcal{F}_{n-1}\right] = 1.$$

Par conséquent, l'évolution du ratio $\pi_n(\theta)/\pi_n(\theta_0)$ n'est pas totalement informatif (c'est une martingale). En revanche, on peut subtilement considérer la racine carrée de ce ratio :

$$\forall \theta \neq \theta_0 \qquad \mathbb{E}\left[\sqrt{\frac{\pi_n(\theta)}{\pi_n(\theta_0)}}|\mathcal{F}_{n-1}\right] = \sqrt{\frac{\pi_{n-1}(\theta)}{\pi_{n-1}(\theta_0)}} \times \mathbb{E}\left[\sqrt{\Lambda_n(\theta)}|\mathcal{F}_{n-1}\right] < \sqrt{\frac{\pi_{n-1}(\theta)}{\pi_{n-1}(\theta_0)}}$$

puisque l'inégalité de Jensen (cas d'égalité dans l'inégalité de Jensen) implique que

$$\forall \theta \neq \theta_0 \qquad \mathbb{E}\left[\sqrt{\Lambda_n(\theta)}|\mathcal{F}_{n-1}\right] < \sqrt{\mathbb{E}\left[\Lambda_n(\theta)|\mathcal{F}_{n-1}\right]} = 1.$$

On en déduit que $r_n(\theta) = \sqrt{\pi_n(\theta)/\pi_n(\theta_0)}$ est une sur-martingale positive donc convergente. Il est même facile de voir que nécessairement

$$\forall \theta \neq \theta_0 \qquad r_n(\theta) \longrightarrow 0 \quad p.s. \qquad \text{lorsque} \qquad n \longrightarrow +\infty.$$

On conclut donc rapidement en remarquant que par définition de l'a posteriori :

$$\pi_n(\theta_0) \left(1 + \sum_{\theta \neq \theta_0} \frac{\pi_n(\theta)}{\pi_n(\theta_0)} \right) = 1.$$

L'ensemble Θ étant fini, on constate que

$$\epsilon_n = \sum_{\theta \neq \theta_0} \frac{\pi_n(\theta)}{\pi_n(\theta_0)} \longrightarrow 0 \quad p.s. \quad \text{lorsque} \quad n \longrightarrow +\infty,$$

ce qui implique alors que

$$\pi_n(\theta_0) \longrightarrow 1$$
 p.s. lorsque $n \longrightarrow +\infty$.

On peut être plus précis dans les estimations précédentes. En effet, jusqu'à présent, nous n'avons pas utilisé d'arguments quantifiant la distance à 1 des quantités $\sqrt{\Lambda_n}$. En

fait, il est facile de voir que

$$\forall \theta \neq \theta_{0} \qquad d_{h}^{2} \left(\mathbb{P}_{\theta}, \mathbb{P}_{\theta_{0}}\right) = \int_{E} \left[\sqrt{\frac{d\mathbb{P}_{\theta}(x)}{d\mathbb{P}_{\theta_{0}}(x)}} - 1 \right]^{2} d\mathbb{P}_{\theta_{0}}(x)$$

$$= \int_{E} \left(\frac{d\mathbb{P}_{\theta}(x)}{d\mathbb{P}_{\theta_{0}}(x)} + 1 - 2\sqrt{\frac{d\mathbb{P}_{\theta}(x)}{d\mathbb{P}_{\theta_{0}}(x)}} \right) d\mathbb{P}_{\theta_{0}}(x)$$

$$= 2 \left[1 - \mathbb{E}\sqrt{\frac{d\mathbb{P}_{\theta}(X)}{d\mathbb{P}_{\theta_{0}}(X)}} \right]$$

Ainsi, la racine du rapport de vraisemblance vérifie en réalité :

$$\mathbb{E}\left[\sqrt{\Lambda_n(\theta)}|\mathcal{F}_{n-1}\right] = 1 - \frac{d_H^2(\mathbb{P}_{\theta}, \mathbb{P}_{\theta_0})}{2} \leqslant e^{-\frac{d_H^2(\mathbb{P}_{\theta}, \mathbb{P}_{\theta_0})}{2}}.$$
 (4.3)

Par conséquent, en utilisant classiquement une méthode de Martingale, on peut définir

$$M_n(\theta) := e^{n\frac{d_H^2(\mathbb{P}_{\theta}, \mathbb{P}_{\theta_0})}{2}} r_n(\theta),$$

et on constate que $M_n(\theta)$ est une sur-martingale positive, donc convergente p.s. et finalement, il existe une constante C assez grande pour laquelle :

$$\forall \theta \neq \theta_0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \qquad r_n(\theta) \leqslant C e^{-n\frac{d_H^2(\mathbb{P}_{\theta}, \mathbb{P}_{\theta_0})}{2}}.$$

On peut alors conclure à nouveau en remarquant que

$$\pi_n\left(\Theta\backslash_{\theta_0}\right) \leqslant C|\Theta|e^{-nh^2}.\tag{4.4}$$

Cela implique a fortiori la convergence de π_n vers δ_{θ_0} à vitesse exponentielle.

4.2.3 Cas où Θ est quelconque

La situation n'est guère plus compliquée en ce qui concerne la philosophie de la preuve précédente. Elle est synthétisée dans la figure 4.1 qui suit.

Étant donné un $\epsilon > 0$, nous allons procéder à un recouvrement de l'ensemble \mathcal{P} par des boules de rayon ϵ au sens de la distance de Hellinger Cet argument est en effet incontournable puisque lorsque \mathbb{P}_{θ} se rapproche de \mathbb{P}_{θ_0} (par exemple au sens de Hellinger), il n'est plus possible de « détacher » de 1 la racine du rapport de vraisemblance $\sqrt{\Lambda_n}$ dans l'équation (4.3). Par contre, lorsqu'on considère des θ en dehors de $B(\mathbb{P}_{\theta_0}, \epsilon)$, cette majoration reste valable et peut même être étendue :

$$\mathbb{E}\left[\sqrt{\frac{\int_{B_{j,\epsilon}} \pi_{n+1}(\theta) d\theta}{\int_{B_{0,\epsilon}} \pi_{n+1}(\theta) d\theta}} | \mathcal{F}_n\right] \leqslant \mathbb{E}\left[\sqrt{\frac{\int_{B_{j,\epsilon}} \pi_n(\theta) d\theta}{\int_{B_{0,\epsilon}} \pi_n(\theta) d\theta}}\right] e^{-c\epsilon^2}$$

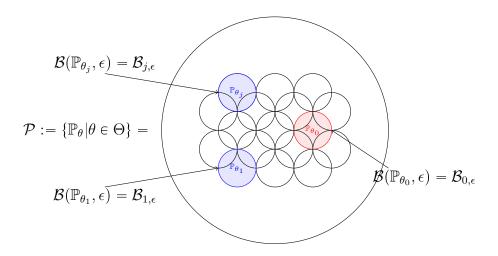


FIGURE 4.1 – Représentation de la consistance bayésienne lorsque Θ est recouvert par un nombre fini de boules.

Enfin, on conclut la convergence exponentielle du moment que le nombre de boules $(B_{j,\epsilon})_j$ noté $N_{\epsilon}(\Theta)$ nécessaires pour couvrir Θ par des boules de rayon ϵ (au sens de la distance de Hellinger) n'est pas trop important pour appliquer (4.4) puisque cette inégalité se récrit dans ce contexte :

$$\pi_n\left(B_{0,\epsilon}^c\right) \leqslant CN_{\epsilon}(\Theta)e^{-cn\epsilon^2}$$

Enfin, un examen minutieux de la preuve du théorème précédent, et de l'inégalité précédente, permet même d'exhiber une méthode pour quantifier la vitesse de décroissance des boules de rayon ϵ optimale préservant la concentration de π_n dans B_{0,ϵ_n} . On énoncera sans démonstration (laissé en exercice) le résultat suivant :

Théorème 4.2.2 On suppose que \mathcal{P} peut être recouvert au sens de Hellinger par $N_{\epsilon}(\Theta)$ boules de rayon ϵ et qu'en plus on a pour une suite ϵ_n tendant vers 0:

$$\log N_{\epsilon_n}(\Theta) \leqslant n\epsilon_n^2,\tag{4.5}$$

$$\pi_0 \left(\tilde{B}_{0,\epsilon_n} \right) \geqslant e^{-Cn\epsilon_n^2}.$$
(4.6)

Alors,

$$\pi_n(B_{0,\epsilon_n}) \longrightarrow 1$$
 p.s. $lorsque \quad n \longrightarrow +\infty.$

En réalité, on a besoin d'une minoration du poids a priori de la boule B_{0,ϵ_n} car si on part avec un poids trop petit autour de cette boule, la dynamique markovienne n'a pas le temps en n itération d'aumenter assez son poids.

De même, le modèle ne doit pas être trop gros sinon la majoration (4.4) ne dit plus grand chose. On constate donc que dans le cas de modèle paramétrique, la vitesse cible est $\epsilon_n = 1/\sqrt{n}$ tandis que pour des situations en dimension infinie, il faut contrôler finement les dimensions entropiques des modèles. Ce genre de question est plus d'ordre statistique que probabiliste. On consultera à profit l'article [GGvdV00] qui donne un exposé très synthétique de la situation, en relation avec des vitesses minimax dans certains modèles. Notez que la preuve qui y est proposée est nettement plus laborieuse que l'utilisation des martingales évoquée plus haut.

4.3 Algorithme EM

L'article fondateur qui peut être consulté est :

[DLR77] A. P. DEMPSTER, N. M. LAIRD, D. B. RUBIN *Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm*, Journal of the Royal Statistical Society. Series B, Vol. 39, No. 1. 1977.

4.3.1 Contexte

L'algorithme EM Expectation - Maximisation est un algorithme d'estimation statistique dans des modèles bayésiens. Il est utile pour trouver l'estimation du maximum a posteriori. Cet estimateur est en général noté le MAP pour l'a priori π sur Θ .

Il s'applique dans un contexte où on dispose d'un modèle statistique $(\mathbb{P}_{\theta})_{\theta \in \Theta}$ générant des variables aléatoires (X, Z). Le souci d'estimation réside dans le fait qu'on observe seulement la coordonnée X et non le couple (X, Z) alors que la maximisation sur le paramètre θ de la vraisemblance complète n'est possible que si on observe le couple (X, Z).

Ainsi, on définit les objets mathématiques suivant.

Définition 4.3.1 (Vraisemblance, Maximum a posteriori) $(\mathbb{P}_{\theta})_{\theta \in \Theta}$ est un modèle générant des variables(X, Z). On suppose observées (X_1, \ldots, X_n) et non observées les variables (Z_1, \ldots, Z_n) sachant que

$$(X_i, Z_i)i.i.d. \sim \mathbb{P}_{\theta^0}.$$

Étant donné un a priori π sur Θ , l'estimateur du maximum a posteriori est défini par

$$\hat{\theta}_n^{MAP} := \arg\max_{\theta \in \Theta} \left\{ \pi(\theta) \mathbb{P}_{\theta} \left[(X_1, \dots, X_n) \right] \right\} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \pi_n(\theta).$$

Si le modèle statistique $(\mathbb{P}_{\theta})_{\theta \in \Theta}$ n'est pas trop gros, et que l'a priori π charge un voisinage de θ^0 positivement, on sait par le biais des théorèmes de la section précédente que la loi a posteriori π_n se concentre sur la valeur θ^0 , lorsque le nombre d'observations $n \longrightarrow +\infty$. Il en est donc de même de $\hat{\theta}_n^{MAP}$. Il s'agit donc de trouver un algorithme d'optimisation efficace permettant d'approcher θ_n^{MAP} .

Hypothèse : Nous supposons que la procédure de calcul de la vraisemblance complète est possible, c'est-à-dire la fonction définie par

$$\ell(X, Z, \theta) := \log \left(\mathbb{P} \left[(X, Z) | \theta \right] \right) + \log \left(\pi(\theta) \right),$$

est disponible au travers d'une formule simple.

4.3.2 Méthode Itérative

Rappel de vocabulaire Nous allons décrire un algorithme extrêmement courant pour le calcul du « MAP » dans les situations de données manquantes. C'est une méthode itérative, et il convient de bien distinguer les itérations de l'algorithme $k \in \mathbb{N}$ du nombre de données définissant le « MAP ». Ainsi, on parlera de **convergence** de l'algorithme lorsque $k \longrightarrow +\infty$ et que

$$\theta_k \longrightarrow \hat{\theta}_n^{MAP}$$
.

Rappelons que l'estimation, elle, est consistante si

$$\hat{\theta}_n^{MAP} \longrightarrow \theta^0$$
 lorsque $n \longrightarrow +\infty$.

Algorithme On définit la suite de paramètres $(\theta_k)_{k\in\mathbb{N}}$ par

- $-\theta_0 \in \Theta$ choisi quelconque.
- Étape E Étant donné $\theta_k \in \Theta$, on définit l'application

$$\theta \in \Theta \longmapsto Q(\theta_k, \theta) := \mathbb{E}_{Z|X, \theta_k} \left[\ell(X, Z, \theta) \right].$$

Ce calcul correspond à l'étape E car Q est une espérance définie au travers la loi $\mathbb{P}(.|\theta_k,X)$

- Étape M On détermine θ_{k+1} comme

$$\theta_{k+1} := \arg \max_{\theta \in \Theta} Q(\theta_k, \theta).$$

Ce calcul correspond à l'étape M car on maximise la fonction $Q(\theta_k, .)$. Dans la définition de la fonction Q, il faut comprendre que lors de l'itération k, on dispose de la valeur courante θ_k du paramètre, des observations X (issues du n échantillon initial qui lui n'a pas bougé). Les observations Z n'ayant pas été observées, nous les simulons au travers de la loi conditionnées aux X observées $\mathbb{P}(.|\theta_k, X)$ et déterminons la valeur de θ_{k+1}

Convergence Nous allons démontrer le théorème suivant de croisance de la vraisemblance complète.

comme étant celle qui a maximisé la vraisemblance simulée selon la loi conditionnelle.

Théorème 4.3.1 (Algorithme EM) La suite $(\theta_k)_{k \in \mathbb{N}}$ définie au travers des itérations EM est telle que $(\log \mathbb{P}(\theta_k|X))_{k \in \mathbb{N}}$ est croissante.

<u>Preuve</u>: L'idée suit le principe des démonstrations dans les algorithmes « max-max ». On cherche à prouver que $\ell(\theta_k|X)$ est croissante, pour cela, on va minorer par une fonction δ la différence :

$$\ell(\theta|X) - \ell(\theta_k|X) \geqslant \delta(\theta_k, \theta),$$

et montrer que $\delta(\theta_k, \theta_{k+1})$ est positive. Ainsi, à chaque étape de l'itération courante, on minore la fonction à maximiser par une fonction plus « tractable » qu'on majore.

On passe désormais aux étapes calculatoires :

$$\ell(\theta|X) - \ell(\theta_k|X) = \log \mathbb{P}_{\theta}(X)\pi(\theta) - \log \mathbb{P}_{\theta_k}(X)\pi(\theta_k),$$

et bien sûr

$$\mathbb{P}_{\theta}(X)\pi(\theta) = \sum_{Z} \mathbb{P}_{\theta}(X, Z)\pi(\theta) = \sum_{Z} \mathbb{P}(X|\theta, Z)\mathbb{P}(Z|\theta)\pi(\theta)$$
$$= \sum_{Z} \frac{\mathbb{P}(X|\theta, Z)\mathbb{P}(Z|\theta)\pi(\theta)}{\mathbb{P}(Z|X, \theta_k)} \times \mathbb{P}(Z|X, \theta_k)$$

On peut alors remarquer que $\mathbb{P}(.|X,\theta_k)$ est une loi de probabilité et l'inégalité de Jensen s'applique par concavité de la fonciton log. Ainsi

$$\log \left(\mathbb{P}_{\theta}(X) \pi(\theta) \right) \geqslant \sum_{Z} \log \left(\frac{\mathbb{P}(X|\theta, Z) \mathbb{P}(Z|\theta) \pi(\theta)}{\mathbb{P}(Z|X, \theta_k)} \right) \mathbb{P}(Z|X, \theta_k).$$

Par ailleurs, le second membre de la différence à étudier s'écrit simplement :

$$\log (\mathbb{P}(X|\theta_k)\pi(\theta_k)) = \sum_{Z} \mathbb{P}(Z|X,\theta_k) \log (\mathbb{P}(X|\theta_k)\pi(\theta_k)).$$

Par conséquent :

$$\log \left(\mathbb{P}_{\theta}(X)\pi(\theta) \right) - \log \left(\mathbb{P}_{\theta_{k}}(X)\pi(\theta_{k}) \right) \geqslant \sum_{Z} \mathbb{P}(Z|X,\theta_{k}) \log \left(\frac{\mathbb{P}(X|\theta,Z)\mathbb{P}(Z|\theta)\pi(\theta)}{\mathbb{P}(Z|X,\theta_{k})} \right) \\ - \sum_{Z} \mathbb{P}(Z|X,\theta_{k}) \log \left(\mathbb{P}(X|\theta_{k})\pi(\theta_{k}) \right) \\ = \sum_{Z} \mathbb{P}(Z|X,\theta_{k}) \log \left(\frac{\mathbb{P}(X|\theta,Z)\mathbb{P}(Z|\theta)\pi(\theta)}{\mathbb{P}(Z|X,\theta_{k})\mathbb{P}(X|\theta_{k})\pi(\theta_{k})} \right) \\ = \sum_{Z} \mathbb{P}(Z|X,\theta_{k}) \log \left(\frac{\mathbb{P}(X,Z|\theta)\pi(\theta)}{\mathbb{P}(X,Z|\theta_{k})\pi(\theta_{k})} \right) \\ := \delta(\theta_{k},\theta).$$

On constate alors que le calcul de $Q(\theta_k, \theta)$ est identique à celui de la fonction δ précédente. Ainsi, d'une itération à l'autre, la loi *a posteriori* évaluée en θ_k grandit. Cela finit la preuve du théorème.

En toute généralité, il est difficile de dire plus que ce résultat car cela réclame alors des propriétés d'unicité du maximum a posteriori. Il existe des critères garantissant ces propriétés d'unicité. On consultera à profit :

[W83] J. Wu On the convergence properties of the EM algorithm, Annals of Statistics, Vol 11 (1) 1983.

4.4 Algorithme SA-EM

4.4.1 Motivations

L'algorithme SA-EM est une version « approximation stochastique » de la méthode EM précédente. Une référence pour ce paragraphe, parmi d'autres, est l'article original introduisant cette méthode.

[DLM99] B. Delyon, M. Lavielle, E. Moulines Convergence of a stochastic approximation version of the EM algorithm, The Annals of Statistics, Vol 27, 1, 1999.

Il s'agit d'une méthode parmi d'autres introduisant une phase d'approximation stochastique, et on pourra rencontrer également des méthodes Monte-Carlo -EM (MCEM). L'idée principale est de substituer la phase E de la méthode EM par une méthode stochastique remplaçant le calcul de la fonction $Q(\theta_k,\theta)$. On sent que les algorithmes stochastiques introduits au chapitre 3 vont pouvoir être utiles puisque

$$Q(\theta_k, \theta) = \mathbb{E}_{Z \sim \mathbb{P}_{\theta_k}(\cdot|X)} [\ell(X, Z, \theta)],$$

et que l'algorithme de Robbins-Monro permet de maximiser (ou minimiser) une énergie s'exprimant sous la forme d'une espérance.

4.4.2 Description de l'algorithme

Algorithme Nous donnons ici une version « simplifiée » de SAEM, et les lecteurs intéressés se documenteront dans [DLM99].

- $-\theta_0$ initialisé quelconque dans Θ .
- Étape SA-E : on simule une donnée « non observée » z_k selon la loi *a posteriori* $\mathbb{P}(.|X,\theta_k)$ où θ_k est la valeur du paramètre de l'itération courante, et X l'ensemble des données observées.
- On calcule alors la nouvelle fonction

$$\hat{Q}_k(\theta) = \hat{Q}_{k-1}(\theta) + \gamma_k \left[\ell(z_k, X, \theta) - \hat{Q}_{k-1}(\theta) \right]$$

- Étape M : On trouve θ_{k+1} en maximisant la fonction \hat{Q}_k .

Hypothèse de modèle exponentiel Dans un cadre classique de modèle exponentiel, il est possible de rendre les choses un petit peu plus explicites. Nous faisons les hypothèses suivantes.

 $(\mathbf{H}_{\mathbf{M}})$: Le modèle est exponentiel et décrit ainsi :

$$\mathbb{P}(X, Z|\theta) = \exp\left(-\psi(\theta) + \langle S(X, Z); \phi(\theta) \rangle\right),\,$$

où S est une fonction à valeurs dans \mathbb{R}^l , $\psi(\theta)$ est une constante de normalisation. Ainsi,

$$\ell(X, Z, \theta) = -\psi(\theta) + \langle S(X, Z); \phi(\theta) \rangle.$$

 $(\mathbf{H_{Smooth1}})$: Les fonctions ϕ et ψ sont $\mathcal{C}^2(\Theta)$. La fonction $\theta \longmapsto \bar{s}(\theta) = \mathbb{E}[S(X,Z)|\theta]$ est $\mathcal{C}^1(\Theta)$ ainsi que la fonction $\theta \longmapsto \mathbb{E}\left[\log \mathbb{P}[(X,Z)|\theta]\right] := l(\theta)$. Bien sûr, si on intègre un a priori π sur Θ , cet a priori s'exprime directement dans la fonction ψ en regardant la loi a posteriori.

 $(\mathbf{H_{Smooth2}})$: Pour toute valeur de s = S(X, Z), la fonction

$$\hat{\theta}(s) := \arg \max -\psi(\theta) + \langle s, \phi(\theta) \rangle + \log(\pi(\theta)),$$

est une fonction $C^1(\Theta)$.

Remarquons alors que sous ces hypothèses de modèle exponentiel, tout peut être reparamétré par la valeur de S(X,Z) ou $S(X,z_k)$. Ainsi, si on note la valeur de S à l'étape k par s_k : l'algorithme EM produirait à l'étape E:

$$s_{k+1} = \mathbb{E}_Z \left[S(X,Z) | X, \theta_k \right].$$

L'algorithme SA-EM, quand à lui, donnerait :

$$s_{k+1} = s_k + \gamma_k \left(S(X, z_k) - s_k \right),$$

où $z_k \sim \mathbb{P}[.|\theta_k, X]$. L'étape M, elle, reste inchangée :

$$\theta_{k+1} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \left[-\psi(\theta) + \langle s_{k+1}, \phi(\theta) \rangle + \log(\pi(\theta)) \right] = \hat{\theta}(s_{k+1}).$$

La plupart des situations où les algorithmes EM/SA-EM sont appliqués s'écrivent comme des modèles exponentiels, avec des fonctions ϕ et ψ explicites. Cela permet d'alléger le notations et faciliter son implémentation.

4.4.3 Convergence de l'algorithme SA-EM

L'idée de la preuve de la convergence de SA-EM est principalement la vérification des conditions d'applicabilité du théorème de Robbins-Monro, décrit dans le chapitre 3. Rappelons que

$$s_{k+1} = s_k + \gamma_k \left[S(X, z_k) - s_k \right],$$

et

$$\theta_k = \hat{\theta}(s_k).$$

On définit la fonction V:

$$\forall s \in \mathcal{S} \qquad V(s) := -\psi(\hat{\theta}(s)) + \langle s, \phi(\hat{\theta}(s)) \rangle = \max_{\theta \in \Theta} \left[-\psi(\theta) + \langle s, \phi(\theta) \rangle + \log(\pi(\theta)) \right].$$

On établit le résultat en nommant ψ la fonction $\psi + \log \pi$. Sous des hypothèses abrégées, on établit le théorème suivant.

Théorème 4.4.1 Sous les hypothèses $(\mathbf{H_M}), (\mathbf{H_{Smooth1}}), (\mathbf{H_{Smooth2}})$ et la condition sur les pas $(\gamma_k)_{k \in \mathbb{N}}$:

$$\sum_{k} \gamma_k = +\infty \qquad \sum_{k} \gamma_k^2 < \infty.$$

Si la suite $(s_k)_{k \ge 1}$ est compacte, alors

$$s_k \longrightarrow \{s \mid \partial_s V(s) = 0\} \quad p.s. \quad lorsque \quad k \longrightarrow +\infty,$$

et bien sûr

$$\theta_k \longrightarrow \{\theta \mid \partial_{\theta}l(\theta) = 0\} \quad p.s. \quad lorsque \quad k \longrightarrow +\infty.$$

Preuve : L'idée de la preuve est d'écrire que

$$s_{k+1} = s_k + \gamma_k h(s_k) + \gamma_k e_k,$$

où $h(s_k)$ désigne la direction principale de descente de l'algorithme et e_k est un incrément de martingale. Dans notre situation, on constate clairement que

$$h(s) := \mathbb{E}_Z \left[S(X, Z) | X, \hat{\theta}(s) \right] - s = \bar{s}(\hat{\theta}(s)) - s,$$

et pour appliquer le théorème de Robbins-Monro, nous devons trouver une fonction T telle que $\nabla T, h \ge 0$ pour conclure (voir théorème 3.3.6). Dans notre cas, on définit

$$L(s,\theta) := -\psi(\theta) + \langle s, \phi(\theta) \rangle,$$

et nous savons que

$$\hat{\theta}(s) = \arg\max_{\theta \in \Theta} L(s, \theta),$$

donc

$$-\psi'(\hat{\theta}(s)) + \langle s, \nabla \phi(\hat{\theta}(s)) \rangle = 0. \tag{4.7}$$

Cette relation se traduit également comme $\partial_{\theta}L(s,\hat{\theta}(s)) = 0$ et en différentiant en s, on obtient :

$$D_{\theta}^{2}L(s,\hat{\theta}(s))\hat{c}_{s}\hat{\theta}(s) = -\nabla\phi(\hat{\theta}(s))^{t}.$$
(4.8)

Par ailleurs, en remarquant qu'on peut dériver sous le signe intégral, on a

$$l'(\theta) = -\psi'(\theta) + \langle \mathbb{E} \left[(X, Z) | \theta \right], \nabla \phi(\theta) \rangle = -\psi'(\theta) + \langle \bar{s}(\theta), \nabla \phi(\theta) \rangle$$

En utilisant (4.7) dans la dernière expression, nous obtenons :

$$l'(\hat{\theta}(s)) = \langle -s + \bar{s}(\hat{\theta}(s)), \nabla \phi(\hat{\theta}(s)) \rangle$$

$$= \langle h(s), \nabla \phi(\hat{\theta}(s)) \rangle$$

$$= -\langle h(s), \partial_s \hat{\theta}(s) D_{\theta}^2 L(s, \hat{\theta}(s)) \rangle$$

Enfin, on a par chaînage:

$$\partial_{s} \left(l(\hat{\theta}(s)) \right) = l'(\hat{\theta}(s)) \partial_{s} \hat{\theta}(s)$$

$$= -\langle h(s), \partial_{s} \hat{\theta}(s) D_{\theta}^{2} L(s, \hat{\theta}(s)) \rangle \partial_{s} \hat{\theta}(s)$$

On peut alors conclure en calculant que

$$F(s) := \langle \partial_s V(s), h(s) \rangle = \langle -\partial_s \left(l(\hat{\theta}(s)) \right), h(s) \rangle = h(s)^t \partial_s \hat{\theta}(s)^t D_{\theta}^2 L(s, \hat{\theta}(s)) \partial_s \hat{\theta}(s) h(s) \leqslant 0.$$

La dernière inégalité est satisfaite car en $\hat{\theta}(s)$, la fonction L est maximale, donc de dérivée seconde négative.

La fonction V est donc décroissante au long des itérations, le théorème de Robbins-Monro permet alors de conclure : la trajectoire converge presque sûrement vers un point critique de V. On obtient alors la conclusion souhaitée pour $(\theta_k)_{k\geqslant 1}$.

Remarque 4.4.1 La condition de compacité de la suite $(s_k)_{k\geqslant 0}$ n'est pas totalement anodine. Elle est parfois évidemment satisfaite lorsque les espaces d'états pour X et Z sont compacts, tout comme Θ et que les densités sont minorés par des quantités strictement positives. Lorsque cette condition n'est pas satisaite, on procède à des méthodes de troncature de la suite $(s_k)_{k\geqslant 0}$ pour la contraindre à appartement à une suite croissante (au sens de l'inclusion) de compacts. On s'appuie alors sur les méthodes d'approximation stochastique contraintes pour conclure. On pourra consulter sur ces méthodes de troncatures dans les algorithmes stochastiques, outre évidemment [DLM99], le livre :

[KY03] H. J. KUSHNER, G. YIN Stochastic Approximation and Recursive Algorithms and Applications. Springer, New-York, 2003.

Chapitre 5

Grandes déviations de Freidlin & Wentzell

La théorie de Freidlin-Wentzell s'intéresse au comportement d'un processus stochastique vu comme la perturbation brownienne d'une équation différentielle ordinaire. Considérons le processus de diffusion

$$dX_{\epsilon}(t) = b(X_{\epsilon}(t))dt + \sqrt{\epsilon}dB_t$$
 avec $X_{\epsilon}(0) = x$,

où b est une fonction régulière (au minimum lipschitzienne). À quoi ressemblent les trajectoires de X_{ϵ} lorsque ϵ est petit? La réponse est double selon les échelles de temps que l'on considère : intervalle de temps fini ou échelle de temps de plus en plus grande. Dans la suite de ce chapitre, nous étudierons donc deux questions :

- Que peut-on dire, à horizon fixé pour $t \in [0,T]$, sur les trajectoires $(X_{\epsilon}(t))_{t \in [0,T]}$ lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$?
- Lorsque le processus $(X_{\epsilon}(t))_{t\in[0,T]}$ est ergodique, et possède une distribution invariante μ_{ϵ} , quel est le comportement asymptotique de $(\mu_{\epsilon})_{\epsilon}$ lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$?

Voici tout d'abord un petit peu de bibliographie.

[DZ98] A. DEMBO ET O. ZEITOUNI Large deviations techniques and applications, Stochastic Modelling and Applied Probability, vol. 38, Springer-Verlag, Berlin, 1998.

[FW79] M. I. Freidlin et A. D. Wentzell Random perturbations of dynamical systems, vol. 260, Springer-Verlag, New York, 1979.

[V84] S. R. S. VARADHAN Large deviations and applications, vol. 46, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1984.

5.1 Théorème de Schilder

La théorie des grandes déviations de Freidlin & Wentzell s'appuie fortement sur le principe de grandes déviations pour le mouvement brownien. Ce principe, ici est dérivé du théorème de Schilder.

5.1.1 Principe de Grande Déviations

Si on considère une famille de mesures $(P_{\epsilon})_{\epsilon>0}$ sur une tribu $\mathcal{B}(E)$ qui converge vers une masse de Dirac δ_{x_0} , le PGD permet de quantifier la nature de la convergence. L'espace

E dans la suite désignera un espace métrique polonais qui est le "support" des mesures $(P_{\epsilon})_{\epsilon>0}$.

Définition 5.1.1 (Principe de Grandes Déviations de taux ϵ et bonne fonction de taux I) On dit que la suite $(P_{\epsilon})_{\epsilon>0}$ satisfait un principe de grandes déviations de fonction de taux I s'il existe une fonction I définie sur E telle que

- 1. $\forall x \in E$ $I(x) \in [0; +\infty]$
- 2. I est s.c.i. : $\forall m \in [0; +\infty[$: l'ensemble $\{x|I(x) \leq m\}$ est un espace fermé et compact de E
- 3. Pour tout fermé $F \subset E$,

$$\lim \sup_{\epsilon \to 0} \epsilon \log P_{\epsilon}(F) \leqslant -\inf_{x \in F} I(x).$$

4. Pour tout ouvert $O \subset E$,

$$\lim \sup_{\epsilon \to 0} \epsilon \log P_{\epsilon}(O) \geqslant -\inf_{x \in O} I(x).$$

Il est possible d'effectuer quelques remarques suite à cette définition.

Remarque 5.1.1 – La fonction I ne s'annule que pour $x = x_0$.

- Surtout, si A est un borélien tel que

$$\inf_{\bar{A}}I=\inf_{\mathring{A}}I=I_{A},$$

alors nous avons l'équivalent :

$$P_{\epsilon}(A) \sim e^{-I_A \epsilon^{-1}}$$
.

- Bien entendu, ce qui définit la notion d'ouvert ou de fermé dans E est fondamental, il est donc à craindre qu'en changeant la topologie de E, on change la nature des principes de grandes déviations qu'on peut obtenir.
- En tant que limite, la fonction de taux est unique dès lors que P_{ϵ} satisfait un principe de grandes déviations.

5.1.2 Boite à outils pour les grandes déviations

Théorème de changement de mesure On rappelle le théorème de Girsanov, fondamental pour les grandes déviations de processus gaussiens. On définit tout d'abord l'espace de Cameron-Martin.

Définition 5.1.2 (Espace de Cameron-Martin)

$$\mathbb{H}_1 := \left\{ f = \int_0^t y \mid y \in L^2(0,1) \right\}.$$

On notera W la mesure de Wiener associée au mouvement Brownien sur [0,1].

Théorème 5.1.1 (Théorème de Girsanov) Pour tout $z \in \mathbb{H}_1$, le processus M_t^z défini par

 $M_t^z := \exp\left(\int_0^t \dot{z}(s)dB_s - \frac{1}{2}\int_0^t \dot{z}(s)^2 ds\right),$

est une martingale (associée à la filtration du mouvement brownien). On définit une nouvelle probabilité Q^z sur E en posant

$$Q^{z}(dw) = M_{1}^{z}(w)\mathcal{W}^{1}(dw),$$

alors le processus W(t) défini par

$$W(t) = B(t) - z(t),$$

est ou mouvement brownien sous la loi Q^z .

Ce résultat est mieux connu dans les situations où on considère des lois de probabilités sur des paramètres (et non sur des trajectoires) comme la fonction de changement de mesure utilisant le rapport de vraisemblance. Plus précisément, et en langage statistique, la martingale exponentielle précédente désigne le rapport de vraisemblance entre l'hypothèse Brownien $(B(t))_{t\geqslant 0}$ et l'hypothèse Brownien drifté $(B(t)-z(t))_{t\geqslant 0}$. Une traduction extrêmement simple se trouve lorsqu'on calcule le rapport de vraisemblance entre deux lois gaussiennes de moyenne différente, et de variance identique. Ce théorème joue un rôle fondamental aussi bien en grandes déviations qu'en statistiques mathématiques non paramétriques, ou encore en finance.

Lemme de Varadhan et Principe de contraction Ces deux résultats sont issus de [DZ98] et constituent les « fondamentaux » de la théorie de grandes déviations. Nous énoncerons ces théorèmes sans les démontrer et le lecteur intéressé pourra alors se référer aux ouvrages évoqués précédemment.

Théorème 5.1.2 (Lemme de Varadhan) $Si(P_{\epsilon})_{\epsilon>0}$ satisfait un PGD de bonne fonction de taux I, et si f est une fonction continue bornée de E dans \mathbb{R} , alors

$$\lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \int_{E} e^{\epsilon^{-1} f} dP_{\epsilon} = \sup_{x \in E} \{ f(x) - I(x) \}$$

Théorème 5.1.3 (Principe de Contraction) Si $(P_{\epsilon})_{\epsilon>0}$ satisfait un PGD de bonne fonction de taux I et si f est une fonction continue de E dans F métrique séparable, alors la famille $(Q_{\epsilon} := P_{\epsilon} \circ f^{-1})_{\epsilon>0}$ satisfait un PGD de fonction de taux J définie par

$$J(y) = \inf_{x|f(x)=y} I(x).$$

5.1.3 Théorème de Schilder

Plaidoirie Le théorème suivant sera utile aussi bien aux probabilistes intéressés par les conséquences trajectorielles de ce processus qu'aux statisticiens qui s'intéressent aux poids des petites boules donnés par la mesure de Wiener. Ce genre de résultats peut avoir

des répercusions aussi bien en optimisation aléatoire qu'en statistiques bayésiennes lorsqu'on étudie des *a priori* trajectoriels pour des estimations de densité ou des problèmes de régression. On consultera par exemple les travaux suivants pour s'appercevoir comment des développements probabilistes des plus théoriques peuvent rebondir sur des applications statistiques inattendues.

[KWL94] J. KUELBS AND W. LI AND W. LINDE, The Gaussian measure of shifted balls, Probability Theory and Related Fields, 98 (2), 1994.

[vdWvZ08] A.VAN DER VAART AND H. VAN ZANTEN, Rates of contraction of posterior distributions based on Gaussian process priors, The Annals of Statistics, 36 (3), 2008.

Énoncé du résultat principal On se place sur $E = C_0([0,1])$, l'ensemble des fonctions continues de [0,1] dans \mathbb{R} , nulles en 0. On notera \mathcal{W}^{ϵ} la loi de probabilités des trajectoires obtenues en considérant $\sqrt{\epsilon}B$ (élément de E) où B est un mouvement brownien standard sur \mathbb{R} . On a alors le résultat suivant.

Théorème 5.1.4 (Théorème de Schilder) La famille W^{ϵ} satisfait un principe de grandes déviations sur E de fonction de taux I donnée par

$$I(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} \int_0^1 |\dot{z}|^2(s) ds & si \quad z \in \mathbb{H}_1, \\ +\infty & sinon. \end{cases}$$

<u>Preuve</u>: On notera B une trajectoire tirée selon la mesure de Wiener W. La norme est celle de la convergence uniforme sur [0,1], et $B(x,\delta)$ sera donc l'ensemble des trajectoires qui sont dans le tube de largeur δ autour de la trajectoire $(x(t))_{t\in[0,1]}$.

On démontre alors le théorème en deux temps, minoration et majoration.

Minoration Soit O un ouvert de E et z une trajectoire de $O \cap \mathbb{H}_1$, on sait que $I(z) < +\infty$ par définition de I. Comme O est ouvert, il existe $\delta > 0$ assez petit tel que $B(z, \delta) \subset O$. On a alors par définition de \mathcal{W}^{ϵ} que

$$\mathcal{W}^{\epsilon}(O) = \mathcal{W}^{1}\left(\sqrt{\epsilon}B \in O\right) \geqslant \mathcal{W}^{1}\left(\sqrt{\epsilon}B \in B(z,\delta)\right)$$

On définit le processus $w(t) = B(t) - z(t)\epsilon^{-1/2}$ et le théorème de Girsanov permet d'écrire que

$$\mathcal{W}^{1}\left(\sqrt{\epsilon}B \in B(z,\delta)\right) = \mathcal{W}^{1}\left(w \in B(0,\delta\epsilon^{-1/2})\right)$$

$$= \int_{B(0,\delta\epsilon^{-1/2})} \exp\left(-\epsilon^{-1/2} \int_{0}^{1} \dot{z}(s)dB_{s}^{\omega} - \frac{1}{2}\epsilon^{-1} \int_{0}^{1} |\dot{z}|^{2}(s)ds\right) \mathcal{W}^{1}(d\omega)$$

$$= e^{-I(z)\epsilon^{-1}} \int_{B(0,\delta\epsilon^{-1/2})} \exp\left(-\epsilon^{-1/2} \int_{0}^{1} \dot{z}(s)dB_{s}^{\omega}\right) \mathcal{W}^{1}(d\omega)$$

Tout le jeu consiste alors à démontrer que lorsque ϵ est assez petit, la principale asymptotique est portée par le premier terme. Remarquons que lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$, on a $\delta \epsilon^{-1/2} \longrightarrow +\infty$ et puisque \mathcal{W}^1 a un support qui est E, on peut choisir ϵ assez petit pour que

$$\mathcal{W}^1\left(B(0,\delta\epsilon^{-1/2})\right)\geqslant \frac{3}{4}.$$

Par ailleurs, l'inégalité de Tchebychev montre que

$$\mathcal{W}^1\left(\int_0^1 \dot{z}(s)dB_s^\omega \geqslant 2\sqrt{2I(z)}\right) \leqslant \frac{\int_0^1 \dot{z}^2(s)ds}{8I(z)} = \frac{1}{4}$$

Par conséquent, on a la minoration de la probabilité :

$$\mathcal{W}^1\left(\underbrace{\exp\left(-\epsilon^{-1/2}\int_0^1\dot{z}(s)dB_s^\omega\right)}_{:=A}\geqslant \exp\left(-\epsilon^{-1/2}2\sqrt{2I(z)}\right)\right)\geqslant \frac{3}{4}.$$

L'ensemble $A \cap B(0, \delta \epsilon^{-1/2})$ est donc de poids supérieur à $\frac{1}{2}$ (faire un dessin!). Mais alors on sait que :

$$\int_{B(0,\delta\epsilon^{-1/2})} \exp\left(-\epsilon^{-1/2} \int_{0}^{1} \dot{z}(s) dB_{s}^{\omega}\right) \mathcal{W}^{1}(d\omega) \geqslant \int_{A \cap B(0,\delta\epsilon^{-1/2})} \exp\left(-\epsilon^{-1/2} \int_{0}^{1} \dot{z}(s) dB_{s}^{\omega}\right) \mathcal{W}^{1}(d\omega)
\geqslant \int_{A \cap B(0,\delta\epsilon^{-1/2})} \exp\left(-\epsilon^{-1/2} 2\sqrt{2I(z)}\right) \mathcal{W}^{1}(d\omega)
\geqslant \frac{1}{2} \exp\left(-\epsilon^{-1/2} 2\sqrt{2I(z)}\right).$$

Nous venons donc de trouver un sous-ensemble de O ayant une probabilité « suffisante » c'est à dire :

$$\mathcal{W}^{\epsilon}(O) \geqslant \frac{1}{2} e^{-\frac{I(z)}{\epsilon} - \frac{2\sqrt{2I(z)}}{\sqrt{\epsilon}}}.$$

En passant au logarithme, on constate que le second terme en $\epsilon^{-1/2}$ devient négligeable devant celui en ϵ^{-1} et

$$\liminf_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \mathcal{W}^{\epsilon}(O) \geqslant -I(z).$$

Ceci est d'ailleurs v
rai pour tout les $z\in\mathbb{H}_1\cap O$ donc

$$\liminf_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \mathcal{W}^{\epsilon}(O) \geqslant -\inf_{z \in O} I(z).$$

Majoration La majoration suit un peu la même idée de preuve. On considère un fermé F de E tel que $0 < I(F) < +\infty$ et on choisit $\eta \in (0, I(F))$. On sait alors que

$$\{x \in E \mid I(x) \leqslant I(F) - \eta\} = K_{I(F) - \eta},$$

est un ensemble compact disjoint de F. On considère δ tel que $0 < \delta < d(F, K_{I(F)-\eta})$. On a donc $x \in F \Longrightarrow d(x, K_{I(F)-\eta}) \ge \delta$, et par conséquent

$$\forall \eta > 0 \qquad \limsup_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \mathcal{W}^{\epsilon}(F) \leqslant \limsup_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \mathcal{W}^{1}(d(\sqrt{\epsilon}B(.), K_{I(F)-\eta}) \geqslant \delta). \tag{5.1}$$

Nous allons montrer que

$$\limsup_{\epsilon \to 0} \epsilon \log W^{1}(d(\sqrt{\epsilon}B(.), K_{l}) \geqslant \delta) \leqslant -l$$
 (5.2)

Cela permettra alors de conclure en raison de l'inclusion d'ensemble précédent donnée dans (5.1). On s'intéresse donc à (5.2) et on forme pour toute trajectoire $x = \sqrt{\epsilon}B$ l'interpolation linéaire de x en les points k/n, $0 \le k \le n$ qu'on note π^n_x . On sait évidemment que $I(x) \ge \pi^n_x$ puisque le chemin linéaire est celui de coût minimal au sens de I. Par ailleurs, on écrit l'inégalité triangulaire :

$$\delta \leqslant d(x, K_l) \leqslant d(x, \pi_x^n) + d(\pi_x^n, K_l).$$

Ainsi, soit $d(\pi_x^n, K_l) = 0$ et dans ce cas $d(x, \pi_x^n) \ge \delta$, soit $d(\pi_x^n, K_l) > 0$ et dans ce cas par définition de K_l $I(\pi_x^n) > l$. On a donc montré l'inclusion :

$$\{x|d(x,K_l) \geqslant \delta\} \subset \{x|I(\pi_x^n) > l\} \cup \{d(x,\pi_x^n) \geqslant \delta\}. \tag{5.3}$$

Nous allons désormais majorer les deux ensembles de l'inclusion précédente :

$$I(\pi_x^n) = \frac{\epsilon n}{2} \sum_{i=0}^{n-1} |B((i+1)/n) - B(i/n)|^2 \sim \frac{\epsilon}{2} \chi_n^2$$

On peut alors controler la probabilité de l'événement précédent avec l'inégalité de Markov :

$$\mathcal{W}^{\epsilon}\left(\left\{x|I(\pi_{x}^{n})>l\right\}\right) = \mathbb{P}\left(\frac{\chi_{n}^{2}}{2}>l/\epsilon\right) \leqslant e^{-(1-\beta)l/\epsilon}\mathbb{E}\left[e^{\frac{1-\beta}{2}\chi_{n}^{2}}\right]$$

Mais comme le dernier terme est une constante $C(\beta, n)$, on a donc :

$$\lim \sup_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \mathcal{W}^{\epsilon} \left(\left\{ x | I(\pi_x^n) > l \right\} \right) \leqslant -(1 - \beta)l.$$

On étudie alors le second terme de (5.3) et on exploite ici la stationnarité des incréments du mouvement Brownien :

$$\mathcal{W}^{\epsilon}\left(d(x, \pi_{x}^{n}) \geqslant \delta\right) \leqslant \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{W}^{\epsilon}\left(\|x - \pi_{x}^{n}\|_{\infty, [i/n, (i+1)/n]} \geqslant \delta\right) \leqslant n\mathcal{W}^{\epsilon}\left(\|x - \pi_{x}^{n}\|_{\infty, [0, 1/n]} \geqslant \delta\right)$$

Si la différence de x et de son interpolée affine est supérieure à δ en un point de [0, 1/n], alors l'un des deux est au moins supérieur à $\delta/2$, et comme π_x^n est l'interpolée affine de x, c'est donc qu'il y a un point pour lequel x est supérieur à $\delta/2$. Cela montre donc que

$$\mathcal{W}^{\epsilon}\left(d(x,\pi_{x}^{n}) \geqslant \delta\right) \leqslant n\mathcal{W}^{1}\left(\|B\|_{\infty,[0,1/n]} \geqslant \frac{\delta}{2\sqrt{\epsilon}}\right).$$

D'après le principe de réflexion, nous savons que

$$\mathcal{W}^1\left(\|B\|_{\infty,[0,1/n]} \geqslant \frac{\delta}{2\sqrt{\epsilon}}\right) = \mathcal{W}^1\left(B(1/n) \geqslant \frac{\delta}{2\sqrt{\epsilon}}\right) \leqslant n \exp\left(-\frac{\delta^2 n}{2\epsilon}\right).$$

En fin de compte, on obtient que

$$\limsup_{\epsilon \to 0} \epsilon \mathcal{W}^{\epsilon} \left(d(x, \pi_x^n) \geqslant \delta \right) \leqslant -\frac{\delta^2 n}{2}.$$

Ainsi, en passant à la limite en n dans le dernier terme, pour tout $\delta > 0$, nous venons de démontrer (5.2). Puis en utilisant (5.2) dans (5.1), on obtient la majoration souhaitée et la conclusion de la preuve.

5.2 Grandes déviations de Freidlin & Wentzell à horizon fini

Nous allons désormais établir le théorème de grandes déviations de Freidlin & Wentzell. Ce résultat concerne les lois \mathbb{P}^{ϵ} des trajectoires

$$dX_{\epsilon}(t) = b(X_{\epsilon}(t))dt + \sqrt{\epsilon}dB_{t}. \tag{5.4}$$

La question principale porte sur le comportement de $(\mathbb{P}^{\epsilon})_{\epsilon \geqslant 0}$ lorsque ϵ tend vers 0, et qu'on considère l'espace des trajectoires (5.4) sur l'intervalle de temps [0, T]. Nous allons établir le résultat principal dans un cas particulier. En réalité, il est généralisable à des situations moins restrictives (drift a priori non lipschitzien, situation hypo-elliptiques, ...). On consultera par exemple :

[A80] R. AZENCOTT Large Deviations theory and Applications Saint-Flour Summer school on Probability Theory, Lecture Notes Math, vol 774, Springer-Verlag, 1980.

[FK06] J. Feng, T. Kurtz *Large deviations for stochastic processes*, Mathematical Surveys and Monographs, vol. 131, 2006.

[GPP13] S. GADAT, F. PANLOUP, C. PELLEGRINI Large Deviation Principle for invariant distributions of Memory Gradient Diffusions, Electronic Journal of Probability, 2013.

[P01] A. Puhalskii Large Deviations and Idempotent Probability, CRC Press, 2001.

Théorème 5.2.1 (Théorème de Freidlin & Wentzell) Supposons que le drift b est Lipschitzien borné, alors $(\mathbb{P}^{\epsilon})_{\epsilon \geqslant 0}$ satisfait un principe de grandes déviations de bonne fonction de taux

$$\forall z \in \mathbb{H}_1 \qquad I(z) := \frac{1}{2} \int_0^T |\dot{z}(s) - b(z(s))|^2 ds,$$

 $et I(z) = +\infty \ si \ z \notin \mathbb{H}_1.$

<u>Preuve</u> Nous allons considérer sans perte de généralités T=1 et démontrer le résultat en utilisant le principe de contraction. Remarquons que la mesure \mathbb{P}^{ϵ} est en réalité $\mathcal{W}^{\epsilon} \circ f^{-1}$ où f est l'application qui étant donnée une trajectoire w continue de [0,1] associe la trajectoire y solution de

$$\forall t \in [0,1]$$
 $y(t) = \int_0^t b(y(s))ds + w(t) + x.$

Le théorème de Cauchy-Lipschitz assure l'existence et l'unicité de y, ce qui permet alors de définir f(w) := y. Montrons que l'application f est continue, et considérons donc deux trajectoires w_1 et w_2 . On a

$$\forall t \in [0,1]$$
 $y_1(t) - y_2(t) = w_1(t) - w_2(t) + \int_0^t b(y_1(s)) - b(y_2(s)) ds.$

Comme l'application b est K-Lipschitzienne, on a alors

$$\forall t \in [0,1] \qquad |y_1(t) - y_2(t)| \le ||w_1 - w_2||_{\infty} + K \int_0^t |y_1(s) - y_2(s)| ds$$

Le lemme de Gronwall assure alors que

$$||y_1 - y_2||_{\infty} \le e^K ||w_1 - w_2||_{\infty}.$$

Cela permet de conclure la continuité de l'application f. Par le théorème de Schilder, la fonction de taux I associée à \mathbb{P}^{ϵ} se déduit de celle de \mathcal{W}^{ϵ} :

$$I(z) = \inf_{w|f(w)=z} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^1 |\dot{w}|^2(s) ds \right\}.$$

Par ailleurs, f est injective puisque si y = f(w), alors

$$\dot{y}(t) = b(y(t)) + \dot{w}(t).$$

Par ailleurs, il est aisé de voir que si w est dans \mathbb{H}_1 , alors y = f(w) est aussi dans \mathbb{H}_1 en appliquant à nouveau le lemme de Gronwall par le biais de

$$\forall t \in [0,1] \qquad \dot{y}(t) \leqslant \dot{w}(t) + K|y(t)| + b(0) \leqslant \dot{y}(t) \leqslant \dot{w}(t) + K \int_0^t |\dot{y}|(s)ds + b(0).$$

On a donc la conclusion : si $z \in \mathbb{H}_1$, alors I(z) est finie puisque son antécédent est nécessairement dans \mathbb{H}_1 et l'expression est donnée par l'énoncé du théorème, sinon, I vaut $+\infty$.

Voici comment il faut comprendre ce résultat : lorsque ϵ tend vers 0, les trajectoires de (5.4) qui « comptent » sont celles qui sont proche du flot différentiel donné par le champ de vecteur b puique la fonction de taux est d'autant plus petite que $\dot{y} \simeq b(y)$. On va donner une traduction plus mathématique dans l'explication suivante.

On considère une fonction $\varphi \in \mathbb{H}_1$ et les trajectoires notées x_{φ} solution de

$$\forall s \in [0, T] \qquad \dot{x}_{\varphi}(s) = b(x_{\varphi}(s)) + \varphi(s), \qquad x(0) = x_0.$$

Ces trajectoires sont dites « contrôlées »par le contrôle φ et bien sûr, si $\varphi = 0$, nous obtenons une trajectoire du système différentiel $\dot{x} = b(x)$. Si on considère l'ensemble des trajectoires obtenues avec $\|\varphi\|_{\mathbb{H}_1} \ge \delta > 0$, le résultat de grandes déviations nous donne une évaluation de la probabilité de telles courbes, par la dynamique (5.4). Nous savons alors que

$$\mathbb{P}^{\epsilon} \left(\{ x_{\varphi} | \| \varphi \|_{\mathbb{H}_{1}} \geqslant \delta > 0 \right) \lesssim e^{-\epsilon^{-1} \delta} \quad \text{lorsque} \quad \epsilon \longrightarrow 0.$$

À l'inverse, le tube de trajectoires telles que $\|\varphi\|_{\mathbb{H}_1} \leq \delta > 0$ est de masse exponentiellement proche de 1 lorsque ϵ tend vers 0. Attention, la structure des trajectoires dites « probables »est décrite par la fonction de taux I, c'est-à-dire par le système dynamique déterministe. Dans la suite, nous admettrons que lorsque la matrice Σ de covariance devant le mouvement brownien est elliptique (minorée au sens des formes quadratiques par c I_d), alors la propriété suivante est satisfaite.

Proposition 5.2.1 On considère le système contrôlé $\dot{x}_{\varphi} = b(x_{\varphi}) + \Sigma \varphi$, alors ce système est exactement contrôlable :

$$\forall (x_0, x_T) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \quad \exists \varphi \in \mathcal{C}(0, T) \qquad x_{\varphi}(0) = x_0 \quad et \quad x_{\varphi}(T) = x_T.$$

Par ailleurs, il est localement contrôlable en tout point si pour tout x_0 de \mathbb{R}^d et tout $\epsilon > 0$:

$$\exists (\delta_{\epsilon}, t_{\epsilon}) \in \mathbb{R}^{2}_{+} \quad \forall x_{T} \in B(x_{0}, \delta_{\epsilon}) \quad \exists \varphi \in \mathcal{C}(0, t_{\epsilon}) : \qquad x_{\varphi}(0) = x_{0}, x_{\varphi}(t_{\epsilon}) = x_{T}, \quad I(x_{\varphi}) \leqslant \epsilon.$$

Les lecteurs intéressés se réfèreront aux conditions dites de « Kalman » dans le livre : [C07] J.M. CORON *Control and Nonlinearity*, Mathematical Surveys and Monographs, 136, 2007.

Retenons qu'on a donc une grande flexibilité pour fabriquer des trajectoires (x_{φ}) et que nous mesurons le coût du contrôle au travers de $I(x_{\varphi})$, c'est-à-dire dans la norme $L^2([0,T])$ de $\dot{\varphi}$, dès lors que bien sûr $varphi \in \mathbb{H}_1$. Bien entendu, lorsque la matrice Σ devient dégénérée, on rencontre des difficultés sur ces notions de contrôlabilité, ce qui fait échos à la stricte positivité de la densité $P_t(x,.)$ (c'est le même problème en réalité).

5.3 Grandes déviations des mesures invariantes

5.3.1 Description du problème

Nous rencontrons désormais dans le coeur de la théorie de Freidlin & Wentzell qui permet une description complète de l' « algèbre » du générateur infinitésimal de (5.4) lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$, et ceci en utilisant des méthodes trajectorielles. La question traitée tout d'abord, est moralement la question de l'obtention d'un principe de grandes déviations lorsque l'horizon devient infini. Nous avons vu dans la partie précédente que nous obtenons le P.G.D. via le principe de contraction, principe qui s'applique aisément par des arguments de type Gronwall, valables uniquement en temps fini. Cependant, on constate que ce dernier point n'est plus faisable dès que l'horizon devient infini.

Là encore, un peu comme pour la démonstration de l'existence de mesures invariantes pour le processus Markovien (5.4), la stratégie peut être double. Soit on utilise un critère de tension pour établir l'existence de la limite de $\epsilon \log \mu_{\epsilon}$, soit on utilise une description trajectorielle pour obtenir le P.G.D. La première méthode est largement décrite dans [P01] ou [FK06]. Pour être cohérent avec ce qui est fait pour la construction de mesure invariante au chapitre 2, nous opterons plutôt pour une construction trajectorielle, issue du chapitre 6 de [FW79].

5.3.2 Classe d'équivalence et quasi-potentiel

5.3.2.1 Définitions

Rappelons que la fonction de taux (appelée aussi fonctionnelle d'action) associée à un horizon fini T est

$$I_T(z) = \frac{1}{2} \int_0^T |\dot{z}(s) - b(z(s))|^2 ds.$$

Nous donnons la définition suivante.

Définition 5.3.1 (Quasi-potentiel) Étant donnés x, y de \mathbb{R}^d , on définit la fonction V_T par

$$V_T(x,y) := \inf \{ I_T(z) \mid z(0) = x \& z(T) = y \}.$$

Enfin, le quasi-potentiel est

$$V(x,y) := \inf_{T>0} V_T(x,y).$$

C'est le coût minimal pour joindre x à y, et ce en s'autorisant des temps arbitrairement grands.

Bien entendu, si x et y sont sur la même courbe intégrale et que x est situé « avant » y, joindre x à y peut se faire à coût nul et dans ce cas, V(x,y) = 0. Notons tout de même que l'ordre est important et qu'on ne peut a priori pas renverser le temps : $V(y,x) \neq 0$:

$$V(x,y) = 0 \Rightarrow V(y,x) = 0.$$

Notons que V est reliée à un principe de grandes déviations au travers de la proposition suivante (non démontrée dans ce cours)

Théorème 5.3.1 ((Freidlin & Wentzell, Chapitre 4)) Étant donnés x,y de \mathbb{R}^d :

$$V(x,y) = \lim_{T \longrightarrow +\infty} \lim_{\delta \longrightarrow 0} \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} -\epsilon \log \mathbb{P}_x^{\epsilon} \left[\tau_{B(y,\delta)} < T \right],$$

où $\tau_{B(y,\delta)}$ est le premier temps de rentrée du processus $(X^{\epsilon})_{t\geq 0}$ solution de (5.4) dans la boule centrée autour de y de rayon δ .

Enfin, la fonction V_T est solution de l'équation d'Hamilton-Jacobi :

$$\frac{\partial V_T(x,y)}{\partial t} + \frac{1}{2} |\nabla_y V_T(x,y)| + \langle b(y), \nabla_y V_T(x,y) \rangle = 0, \tag{5.5}$$

avec $V_0(x, x) = 0$ et $V_T(x, y) \ge 0$.

Il existe un parallèle entre le problème de contrôle donné dans V_T et V, les équations aux dérivées partielles d'Hamilton-Jacobi, et les processus de diffusion. Ce lien peut être obtenu en effectuant une transformation de Hopf-Cole $\log p_t^{\epsilon}(x,y) = \log(Z) - W_t(x,y)\epsilon^{-1}$. Les analystes ont alors développé un bataillon de méthodes pour effectuer les passages à la limite $\epsilon \to 0$ (solutions de viscosité). Voici un point d'entrée bibliographique.

[B94] G. Barles Solutions de viscosité des équations de Hamilton-Jacobi, Collection : Mathématiques & Applications, Springer.

[CIL92] M. G. CRANDALL, H. ISHII AND P.L. LIONS User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations Bull. Amer. Math. Soc. 27, 1-67, 1992.

5.3.2.2 Résultats admis sur le quasi-potentiel

Nous allons donner une série de lemmes techniques qui sont vrais du moment que le domaine d'évolution noté M est compact, que le drift b est Lipschitzien et la matrice de diffusion non dégénérée. En réalité, ces lemmes peuvent rester vrai dans des situations plus générales qu'il convient alors d'étudier plus minutieusement. Nous nous placerons plus bas dans une situation où nous les considérons comme acquis dans le contexte d'étude.

Lemme 5.3.1 i) V(.,.) est une fonction continue sur $M \times M$ et il existe L > 0 tel que si T = |x - y|, alors

$$V_T(x,y) \leqslant L|x-y|.$$

ii) Pour tout $\gamma > 0$ et tout compact $K \subset M$, il existe T_0 tel que $\forall (x,y) \in K$ on peut trouver une trajectoire z_{φ} pour laquelle :

$$I_T(z_{\varphi}) \leq V(x,y) + \gamma \quad avec \quad T \leq T_0.$$

<u>Preuve</u>: Nous donnons la preuve du i). On sait que la matrice de diffusion est non générée et donc toutes les trajectoires sont admissibles : en effet, étant donnée une trajectoire z telle que z(0) = x et z(T) = y, il suffit d'écrire que le contrôle φ vérifie

$$\forall t \in [0; T] \qquad \dot{\varphi} = \sigma^{-1} [\dot{z}(t) - b(z(t))],$$

pour constater que la trajectoire est admissible.

Nous considérons ensuite la trajectoire z affine entre x et y. Son équation est

$$z(t) = x + \frac{y - x}{T}t,$$

et vérifie bien la contrainte z(0) = x et z(T) = y. On constate alors que

$$I_T(z) = \frac{1}{2} \int_0^T |\dot{z}(s) - b(z(s))|^2 ds \leqslant T \frac{\left[1 + \|b\|_{\infty}\right]}{2}.$$

Ce dernier point conclut la preuve du premier point et implique bien sûr la continuité de la fonction V en le point de départ et le point d'arrivée par un petit jeu d'écritures sur les inf. Par exemple, considérons $(x,y) \in M^2$ et $\epsilon > 0$, on choisit $\delta = \epsilon/L$ et on sait que l'on peut joindre y à n'importe quel point de $\tilde{y} \in B(y,\delta)$ avec un coût inférieur à ϵ en un temps au plus δ . Puis,

$$\inf_{T>0} V_T(x, \tilde{y}) \leqslant \inf_{T_1>0, T_2>0} [V_{T_1}(x, y) + V_{T_2}(x, y)] \leqslant V_T(x, y) + \epsilon.$$

On peut bien sûr effectuer le même raisonnement en retournant le rôle de y et \tilde{y} pour conclure à la continuité de V(x,.).

On laisse de côté le point ii) qui est nettement plus délicate et exploite la compacité de K ainsi que la structure particulière des chemins affines entre deux points.

Définition 5.3.2 (Classe d'équivalence) Si V(x,y) = V(y,x) = 0, on dit alors que $x \sim y$. Cette relation est une relation d'équivalence qui ne dépend que du système dynamique décrit dans b.

Le lemme suivant décrit la situation où l'ODE possède des ensembles ω -limite, c'està-dire où les classes d'équivalence sont non triviales.

Lemme 5.3.2 S'il existe $y_0 \sim x_0$ avec $y_0 \neq x_0$, alors **toute** la trajectoire du système dynamique $\dot{x} = b(x)$ initialisée en x_0 appartient à la classe d'équivalence de x_0 .

5.3.2.3 Dynamique aléatoire autour des classes d'équivalence

Cette distinction de classe d'équivalence est décrite dans le lemme suivant.

Lemme 5.3.3 Pour toute classe d'équivalence compacte $K \subset M$ (inclusion stricte), si τ_K^{δ} désigne le temps de sortie de $\mathcal{V}_{\delta}(K)$ (δ -voisinage de K), alors pour tout $\gamma > 0$, il existe $\delta > 0$ et ϵ_0 assez petit pour lequel

$$\forall \epsilon < \epsilon_0 \quad \forall x \in K \qquad \mathbb{E}_x^{\epsilon} \left[\tau_K^{\delta} \right] < e^{\gamma \epsilon^{-1}}.$$

Autrement dit, c'est tout de même assez long de sortir de la classe d'équivalence dans K.

<u>Preuve</u> : On considère un point z qui est dans $M\backslash K$ et suffisamment proche de K si L est défini dans le Lemme 5.3.1 :

$$d(z,K) \leqslant \frac{\gamma}{3L}.$$

Considérons $\delta = d(z, K)/2$ et un δ voisinage de K contenant un point x. Notons x' le point de K le plus proche de x et y le point le plus proche de z qui est dans K.

D'après le Lemme 5.3.1, partie ii), on sait que pour toute paire de points $(x', y) \in K$, il existe un chemin $(\varphi_t)_{t \in [0;T]}$ tel que

$$I_T(\varphi) \leqslant V(x', y) + \gamma/3,$$

et le temps nécessaire pour effectuer ce chemin ne dépend que de γ mais ne dépend ni de x', ni de y. Par ailleurs, comme tous les points de K sont équivalents, nous savons que

$$T \leqslant T_0(\gamma)$$
 et $I_T(\varphi) \leqslant \gamma/3$.

Ensuite, le Lemme 5.3.1 permet également de compléter le chemin en joignant x à x' et y à z avec un coût inférieur à $\gamma/6$ et $\gamma/3$ en vertu du i) du Lemme 5.3.1.

La longueur totale (en temps) du chemin est majoré uniformément sur $x \in K$ et $z \in \mathcal{V}_{\delta}(K)$ par $T_0(\gamma) + \gamma/2 := \tilde{T}_0(\gamma)$ et son coût est lui majoré par $5\gamma/6$. Enfin, si le chemin obtenu est de longueur (en temps) inférieure strictement à $\tilde{T}_0(\gamma)$, nous complétons simplement la trajectoire par une courbe intégrale de l'ODE $\dot{z} = b(z)$, courbe qui a un coût nul.

Nous allons alors utiliser le principe de grandes déviations en temps fini pour obtenir la majoration souhaitée. Remarquons que φ nous définit une trajectoire de sortie et que tout tube de taille δ autour de φ sort également de $\mathcal{V}_{\delta}(K)$. Ainsi :

$$\mathbb{P}_{x}^{\epsilon}[\tau_{K}^{\delta} < \tilde{T}_{0}(\gamma)] \geqslant \mathbb{P}_{x}^{\epsilon}[B(\varphi, \delta)],$$

où $B(\varphi, \delta)$ est l'ensemble des trajectoires autours de φ , de longueur $T_0(\gamma)$ et d'épaisseur δ (au sens de la norme infinie). Le Théorème de grandes déviations de Freidlin & Wentzell assure alors que

$$\mathbb{P}_x^{\epsilon} \left[B(\varphi, \delta) \right] \geqslant e^{-0.9\gamma \epsilon^{-1}}.$$

puisque $0.9\gamma > 5/6\gamma$ et que le dernier terme de l'équation précédente minore donc le terme obtenu dans l'équivalent du P.G.D. On en déduit donc que

$$\mathbb{P}_x^{\epsilon} \left[\tau_K^{\delta} \geqslant \tilde{T}_0(\gamma) \right] \geqslant 1 - e^{-0.9\gamma \epsilon^{-1}},$$

et finalement la propriété de Markov assure que

$$\mathbb{P}_x^{\epsilon} \left[\tau_K^{\delta} \geqslant n \tilde{T}_0(\gamma) \right] \geqslant \left[1 - e^{-0.9\gamma \epsilon^{-1}} \right]^n.$$

On peut alors en déduire une majoration du temps moyen de sortie : une intégration par partie discrète montre que

$$\mathbb{E}_{x}^{\epsilon}[\tau_{K}^{\delta}] \leqslant \tilde{T}_{0}(\gamma) \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}_{x}^{\epsilon} \left[\tau_{K}^{\delta} \geqslant n \tilde{T}_{0}(\gamma) \right] \leqslant \tilde{T}_{0}(\gamma) e^{0.9 \gamma \epsilon^{-1}}.$$

On choisit alors ϵ assez petit pour « manger » le $\tilde{T}_0(\gamma)$, cela conclut la preuve du lemme.

Par ailleurs, nous énonçons également une minoration des espérances de temps de sortie au travers du résultat suivant.

Lemme 5.3.4 Si K est un compact et G un ensemble contenant K, alors il existe un voisinage de $g := \mathcal{V}_{\delta}(K)$ tel que

$$\mathbb{E}_{x}^{\epsilon} \int_{0}^{\tau_{G}} \chi_{g}(X_{t}^{\epsilon}) dt > e^{-\gamma \epsilon^{-1}}.$$

Enfin, nous pouvons minorer les temps de sortie de compact ne contenant pas de classes d'équivalences (« ω -limit set ») :

Lemme 5.3.5 Si K est un compact ne contenant pas d' ω -limit set, alors il existe c et T_0 tels que pour ϵ assez petit et $T \geqslant T_0$:

$$\forall x \in K$$
 $\mathbb{P}_x^{\epsilon} \left[\tau_K > T \right] \leqslant e^{-\epsilon^{-1} c (T - T_0)}$

Ces lemmes précédents illustrent la forte propention de la dynamique à suivre la dynamique lorsque $\epsilon \mapsto 0$. Ils se démontrent tous les deux en fabriquant une trajectoire dont le coût est connu, et tel que l'horizon est fini. On utilise alors le P.G.D. en temps fini pour conclure. On consultera pour plus de détails le paragraphe 1 du chapitre 6 de [FW79].

Par exemple, le Lemme 5.3.3 nous dit que le temps de sortie d'un attracteur est assez long en moyenne. Le Lemme 5.3.4 assure que lorsqu'on sort d'un domaine, on passe la plupart de son temps à l'intérieur du domaine et non à sa frontière. Enfin, le lemme 5.3.5 explique que lorsque ϵ est assez petit, la queue de distribution du temps de sortie d'un ensemble sans attracteur est relativement petite.

5.3.3 Le retour de la chaîne squelette

Nous nous plaçons dans une situation dynamique ergodique (voir chapitre 2, paragraphe 2.2.3) où le générateur infinitésimal est uniformément elliptique. Ainsi, nous savons que les temps de retour dans les compacts sont finis p.s. Nous construisons alors la chaîne squelette en définissant l'ensemble compact de « retour »en utilisant réellement la structure dynamique supposée de l'ODE $\dot{x} = b(x)$ et du processus $(X_t^{\epsilon})_{t \geq 0}$ lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$.

Ainsi, nous effectuons l'hypothèse importante que dans l'ensemble de définition M, il y a un **nombre fini** d'ensembles ω -limites K_1, \ldots, K_l tels que

- 1. Pour tout couple $(x, y) \in K_i$, $x \sim y$.
- 2. Si $x \in K_i$ et $y \in K_j$ avec $i \neq j$, alors x et y ne sont pas équivalents.
- 3. Tout ensemble ω limite de l'ODE est contenu entièrement dans un des compacts K_i . Nous allons ensuite construire la chaîne squelette en se basant sur la figure 5.1.

On définit ρ_0 la distance minimale entre deux ensembles ω limites :

$$\rho_0 := \inf_{i \neq j} d(K_i, K_j),$$

et on considère une distance $\rho_1 < \rho_0/2$.

$$U$$

$$X_{ au_1'(\Gamma)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad \Gamma$$

$$K_1 \qquad \qquad \qquad X_{ au_1(\partial g)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad X_{ au_1(\partial g)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad X_{ au_1(\partial g)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad X_{ au_2(\partial g)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad X_{ au_2(\partial g)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad X_{ au_2(\Gamma)}^{arepsilon,z} \qquad \qquad$$

FIGURE 5.1 – Représentation graphique des voisinages g_i autour des compacts K_i , le processus $(X_t^{\varepsilon,x})_{t\geqslant 0}$, et la chaine squelette définie sur les compacts K_i .

Définition 5.3.3 (Ensembles $(g_i)_{i=1...k}$, Γ) Nous considérons des voisinages de chaque K_i , notés g_i tels que ces voisinages sont disjoints deux à deux :

$$g_i := \mathcal{V}_{\rho_1}(K_i).$$

Par ailleurs, Γ est le complémentaire de la réunion des ρ_0 voisinages de K_i :

$$\Gamma = M \setminus \bigcup_{i=1}^{l} \mathcal{V}_{\rho_0}(K_i),$$

et on définit $\Gamma_i := \mathcal{V}_{\rho_0}(K_i)$ les voisinages de K_i de taille $\rho_0 > \rho_1$.

Remarque 5.3.1 Les ensembles U et U_1 ne servent a priori a rien dans la situation où l'espace M est compact. Ils peuvent avoir une importance lorsque M est naturellement non borné et dans ce cas, U et U_1 sont deux gros compacts pour lesquels le processus possède des temps de retour avec moments exponentiels. Nous ne considèrerons pas ce cas pour simplifier la présentation.

Définition 5.3.4 (Construction de la chaîne squelette) Nous définissons alors la chaîne squelette en utilisant les ensembles (g_i) et Γ . On définit la suite de temps d'arrêt

$$\tau_0 := 0 \qquad et \qquad \tau'_n := \inf \{ t \geqslant \tau_n \mid X_t^{\epsilon} \in \Gamma \}$$

puis

$$\forall n \geqslant 0 \qquad \tau_{n+1} := \inf \left\{ t \geqslant \tau'_n \quad | \quad X^{\epsilon}_t \in \cup_{i=1}^l g_i \right\}.$$

Bien sûr, nous supposons dans la suite que le processus est ergodique, à ϵ fixé, et donc les temps d'arrêts définis au dessus sont finis p.s. La chaîne squelette est alors

$$\forall i \in \mathbb{N} \qquad Z_i^{\epsilon} := X_{\tau_i}^{\epsilon}.$$

Nous utiliserons la notation \mathbb{Q}^{ϵ} pour sa matrice de transition.

Nous allons exploiter cette chaîne squelette, qui lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$, se comporte comme une chaîne à espace d'états finis (les $(g_i)_{i=1...l}$). Nous allons alors nous servir des transitions entre états de cette chaîne pour en déduire une représentation de sa mesure invariante, puis ensuite remonter à la mesure invariante de $(X_t^{\epsilon})_{t\geq 0}$. Pour ce faire, nous définissons

Définition 5.3.5 (Coût de transition) On définit les coûts de transition

$$\tilde{V}(K_i, K_j) := \inf_{T>0} \left\{ I_T(\varphi) \quad | \quad \varphi(0) \in K_i \quad et \quad \varphi(0) \in K_j \quad et \quad \forall s \in [0, T] \quad \varphi(s) \notin \bigcup_{k \neq i, j} K_k \right\}$$

et bien sûr les extensions :

$$\tilde{V}(x, K_j) := \inf_{T>0} \{ I_T(\varphi) \mid \varphi(0) = x \quad et \quad \varphi(T) \in K_j \quad et \quad \forall s \in [0, T] \quad \varphi(s) \notin \bigcup_{k \neq j} K_k \}$$

$$\tilde{V}(K_i, y) := \inf_{T > 0} \{ I_T(\varphi) \mid \varphi(0) \in K_i \quad et \quad \varphi(T) = y \quad et \quad \forall s \in [0, T] \quad \varphi(s) \notin \bigcup_{k \neq i} K_k \}$$

$$\tilde{V}(x,y) := \inf_{T>0} \{ I_T(\varphi) \mid \varphi(0) = x \quad et \quad \varphi(T) = y \quad et \quad \forall s \in [0,T] \quad \varphi(s) \notin \bigcup_k K_k \}$$

L'intérêt de ces définitions se situe dans la proposition suivante qui donne une estimation des transitions pour la chaîne squelette.

Proposition 5.3.1 Les deux propriétés sont satisfaites :

i) Pour tout $\gamma > 0$, on peut choisir ρ_0 et ρ_1 suffisamment petits tels que pour ϵ assez petit et pour tout x dans g_i :

$$e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i,K_j)+\gamma]} \leqslant \mathbb{Q}(x,g_i) \leqslant e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i,K_j)-\gamma]}$$

ii) Pour tout $\gamma > 0$, on peut choisir ρ_0 et ρ_1 assez petits pour que pour tout $x \in \Gamma$,

$$e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(x,K_j)+\gamma]} \leqslant \mathbb{P}_x^{\epsilon}[X_{\tau_1}^{\epsilon} \in g_j] \leqslant e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(x,K_j)-\gamma]}$$

<u>Preuve</u>: On ne fait que la preuve du i), puisque le ii) suit la même idée. On commence par remarquer que si $\tilde{V}(K_i, K_j) = +\infty$, cela signifie qu'il n'y a aucun moyen de joindre K_i à K_j par une courbe continue sans passer par un autre ensemble K_k , avec $k \neq i, j$. Ainsi, la chaîne Z^{ϵ} ne peut effectuer la transition $x \mapsto K_j$, ce qui répond alors implicitement à l'affirmation de la proposition.

On étudie maintenant le cas où $\tilde{V}(x,K_j) < +\infty$ en envisageant séparément les minorations et majorations. On commence par remarquer que pour tous les ensembles tels que $\tilde{V}(K_i,K_j) < +\infty$, il y a nécessairement une courbe $\varphi^{i,j}$ joignant K_i à K_j admissible (qui n'intersecte pas les autres points stables) et telle que

$$I_{T_i,j}(\varphi^{i,j}) \leqslant V(K_i,K_j) + \frac{\gamma}{2}.$$

Le temps mis pour transiter peut être alors majoré par le $\max_{i,j} T_{i,j} + K := T_0$, où K est une constante assez grande qui ne dépend que de γ .

Si $x \in g_i$, nous pouvons joindre x à $\varphi^{i,j}$ à coût inférieur à $\gamma/4$ du moment qu'on réduit la taille du voisinage g_i autour de K_i : en effet, si on considère le point de K_i (noté x') le plus proche de x, celui-ci est à distance suffisante pour assurer un coût inférieur à $\gamma/4$, il pour cela de prendre ρ_1 assez petit. Ensuite, on peut joindre à coût nul x' à $\varphi^{i,j}(0)$ car K_i

est un ensemble ω -limite. Ceci est également vrai pour $y \in g_j$ que l'on joint à l'extrémité $\varphi^{i,j}(T_0)$ pour un coût inférieur à $\gamma/4$.

La courbe ainsi obtenue joint x à y avec un coût inférieur à $V(K_i, K_j) + \gamma$. Bien entendu, si j = i, on peut faire la même construction en forçant la courbe à sortir de G_i puis revenir avec un coût plus petit que γ (ici $V(K_i, K_i) = 0$).

Il est temps d'utiliser alors le P.G.D. à horizon fini pour un tube de trajectoires autour de la trajectoire construite précédemment. On considère δ positif assez petit pour que le tube $B(\varphi, \delta)$ soit une trajectoire admissible : il sort de Γ_i , rentre dans Γ_j et touche nécessairement g_j avant le temps T_0 . Par ailleurs, δ peut être choisi assez petit pour que le tube ne rencontre pas un autre ensemble Γ_k , avec $k \neq i, j$. Ainsi, nous obtenons

$$\mathbb{Q}(x, g_i) \geqslant \mathbb{P}_x^{\epsilon}(B(\varphi, \delta)) \geqslant e^{-\epsilon^{-1}[V(K_i, K_j) + \gamma]}.$$

On obtient ainsi la minoration cherchée.

La majoration suit finalement la même idée que dans la preuve initiale du théorème de Schilder. On sait d'après le Lemme 5.3.5 qu'il existe un temps T_1 assez grand pour lequel

$$\mathbb{P}_x^{\epsilon} [\tau_1 > T_1] \leqslant e^{-\epsilon^{-1}cT_1/2} \leqslant e^{-\epsilon^{-1}[V(K_i, K_j) - \gamma/2]}.$$

Étant donné x dans g_i , on considère toutes les courbes φ dont le temps de parcours est au moins $2T_1$ et telles que

$$I_{2T_1} \geqslant \tilde{V}(K_i, K_j) - \gamma/2.$$

Ceci est bien sûr trivialement possible. On notera $K^x_{2T_1,\tilde{V}(K_i,K_j)-\gamma/2}$ cet ensemble fermé de trajectoires. On a alors

$$\mathbb{Q}(x,g_j) = \mathbb{P}^{\epsilon}_x \left(X^{\epsilon}_{\tau_1} \in g_j \right) = \mathbb{P}^{\epsilon}_x \left[\tau_1 > T_1, X^{\epsilon}_{\tau_1} \in g_j \right] + \mathbb{P}^{\epsilon}_x \left[\tau_1 \leqslant T_1, X^{\epsilon}_{\tau_1} \in g_j \right]$$

Par ailleurs, si $\tau_1 \leqslant T_1$, on en déduit nécessairement que la distance entre X_x^{ϵ} et φ est supérieure à $\rho_1 > 0$ car la trajectoire X^{ϵ} atteint sa cible en T_1 alors que toutes les trajectoires φ de $K_{2T_1,\tilde{V}(K_i,K_j)-\gamma/2}^x$ « trainent » jusqu'au temps $2T_1$. On en déduit donc l'inclusion :

$$\left\{X_{\tau_1}^{\epsilon} \in g_j \quad \text{et} \quad \tau_1 \leqslant T_1\right\} \subset \left\{d\left(X^{\epsilon}, K_{2T_1, \tilde{V}(K_i, K_j) - \gamma/2}^x\right) \geqslant \rho_1\right\}.$$

On peut alors appliquer le P.G.D. en horizon fini sur $[0, 2T_1]$ et obtenir que

$$\mathbb{Q}(x, g_j) \le e^{-\epsilon^{-1}T_1/2} + e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i, K_j) - \gamma/2]} \le 2e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i, K_j) - \gamma/2]}.$$

Quitte à choisir ϵ assez petit, nous voyons alors que la dernière probabilité peut être majorée par $e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i,K_j)-\gamma]}$ en « mangeant » le facteur 2 devant la probabilité. Cela conclut la preuve de la proposition.

5.3.4 Étude de la chaîne squelette

Nous rappelons dans ce paragraphe la notion de $\{i\}$ -graphe, notion classique en chaîne de Markov, puis exploitons cette notion au regard des encadrements des transitions obtenues précédemment.

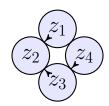


FIGURE 5.2 – Un exemple de $\{z_2\}$ -graphe.

Définition 5.3.6 ($\{i\}$ -graphe) Considérons L un ensemble fini, et $i \in L$ un élément de cet ensemble. Un $\{i\}$ -graphe est un graphe orienté tel que

- Tout point de L possède exactement une seule arête sortante.
- Il n'y a pas de cycles dans le grpahe.
- De tout point de L existe une suite d'arêtes menant à $\{i\}$ (état terminal du graphe). Enfin, on note $\mathcal{G}(\{i\})$ l'ensemble des $\{i\}$ -graphes qu'on peut former sur l'ensemble fini L.

Un exemple de $\{i\}$ -graphe est donné dans la Figure 5.2

Cette notion de $\{i\}$ -graphe s'exploite par exemple pour décrire la mesure invariante d'une chaîne de Markov décrite par sa matrice de transition.

Proposition 5.3.2 (Mesure invariante d'une chaîne de Markov et $\{i\}$ -graphes) Si on note $P = (p_{i,j})_{1 \leq i,j \leq L}$ la matrice de transition d'une chaîne irréductible, et si on définit pour g un graphe orienté $\pi(g)$:

$$\pi(g) := \prod_{(m \to n) \in g} p_{mn} \qquad et \qquad \forall i \in [1, L] \qquad Q_i := \sum_{g \in \mathcal{G}(\{i\})} \pi(g). \tag{5.6}$$

Alors, la distribution invariante μ de la chaîne de Markov est

$$\mu(i) = \frac{Q_i}{\sum_{j=1}^{L} Q_j}.$$

Preuve : La preuve est très simple et classique. On cherche à vérifier que

$$\forall i \in [1, L] \qquad Q_i = \sum_{j=1}^L Q_j p_{ji}$$

On écrit simplement que

$$Q_i - \sum_{j=1}^{L} Q_j p_{ji} = Q_i \sum_{k=1}^{L} p_{ik} - \sum_{j=1}^{L} Q_j p_{ji} = Q_i \sum_{k \neq i} p_{ik} - \sum_{j \neq i} Q_j p_{ji}.$$

On étudie alors le premier terme

$$Q_i \sum_{k \neq i} p_{ik} = \sum_{g \in \mathcal{G}(\{i\})} \pi(g) \sum_{k \neq i} p_{ik}$$

Cette somme correspond à la somme des $\pi(g)$ lorsque le graphe g parcourt l'ensemble des graphes tels que :

- (A) Tout point de L est le point de départ d'une seule arête.
- (B) Il y a exactement un seul cycle dans le graphe et celui-ci contient $\{i\}$. De la même façon, le second terme est

$$\sum_{j \neq i} Q_j p_{ji} = \sum_{j \neq i} \sum_{g \in \mathcal{G}(\{j\})} \pi(g) p_{j,i}$$

et on tombe alors sur le même ensemble de graphes vérifiant les conditions (A) et (B). \Box Le lemme suivant est totalement central et déduit des transitions obtenues dans la proposition 5.3.1 et de la représentation de la mesure invariante donnée dans la proposition précédente une estimation de la mesure invariante de chaque compact K_i (ensemble ω -limite).

Lemme 5.3.6 (Encadrement de la mesure invariante) Si X est une chaîne de Markov de transition \mathbb{Q} dont l'espace d'état est partitionné en un nombre fini d'états $(g_i)_{i \in [\![1,L]\!]}$ et supposons qu'il existe des poids positifs $p_{i,j}$ et un nombre a > 1 tel que

$$\forall (i,j) \in [1,L]^2 \quad \forall x \in g_i \qquad a^{-1}p_{i,j} \leqslant \mathbb{Q}(x,g_j) \leqslant ap_{i,j},$$

alors toute mesure invariante ν vérifie :

$$a^{2-2L} \frac{Q_i}{\sum_{j=1}^{L} Q_j} \le \nu(g_i) \le a^{2L-2} \frac{Q_i}{\sum_{j=1}^{L} Q_j},$$

où les Q_i sont donnés par (5.6).

<u>Preuve</u>: Là encore, la démonstration est très simple. On appelle $\nu(g_i)$ le poids de l'ensemble g_i sous la mesure stationnaire ν de la chaîne X et on considère la chaîne de Markov à espaces d'états fini formée par la suite des espaces g_i visités. Nous utilisons alors comme matrice de transition

$$\forall (i,j) \in [1,L]^2$$
 $q_{i,j} = \frac{1}{\nu(g_i)} \int_{q_i} \mathbb{Q}(x,g_j)\nu(dx).$

On constate alors immédiatement (c'est la construction!) que $(\nu(g_i))_{i \in [\![1,L]\!]}$ est invariante pour la chaine à espace d'états finis. Par ailleurs, on a l'encadrement :

$$a^{-1}p_{i,j} \leqslant q_{i,j} \leqslant ap_{i,j},\tag{5.7}$$

en intégrant l'hypothèse sur $x \in g_i$ et en utilisant la définition de $q_{i,j}$. On applique alors la proposition 5.3.2 à cette chaîne lorsque $\tilde{\pi}(g)$ et $(\tilde{Q}_i)_{i \in [\![1,L]\!]}$ sont définis avec les transitions données dans $(q_{i,j})$. Ainsi, on obtient :

$$\nu(g_i) := \frac{\tilde{Q}_i}{\sum_{j=1}^L \tilde{Q}_j}.$$

En utilisant (5.7) dans l'égalité précédente, comme on sait qu'il y a L-1 transitions multipliées dans l'expression de $\tilde{\pi}(g)$, on a bien

$$a^{1-L}\pi(g) \leqslant \tilde{\pi}(g) \leqslant a^{L-1}\pi(g),$$

puis bien sûr

$$a^{1-L}Q_i \leqslant \tilde{Q}_i \leqslant a^{L-1},$$

et enfin

$$\frac{a^{1-L}}{\sum\limits_{i=1}^{L}Q_{i}}\leqslant\frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{L}\tilde{Q}_{i}}\leqslant\frac{a^{L-1}}{\sum\limits_{i=1}^{L}Q_{i}}$$

Cela permet alors de conclure à l'encadrement désiré.

5.3.5 Comportement de la mesure invariante

Nous revenons désormais au problème initial qui concerne l'étude des grandes déviations de la mesure invariante de la diffusion de drift b:

$$dX_t^{\epsilon} = b(X_t^{\epsilon})dt + \sqrt{\epsilon}dB_t.$$

Le point clef consiste à utiliser la représentation de la mesure invariante μ^{ϵ} donnée dans le chapitre 2 et les encadrements du lemme 5.3.6. Si on note $g = \bigcup g_i$ et $\Gamma = M \setminus \bigcup \Gamma_i$, on peut utiliser la formule

$$\mu^{\epsilon}(B) \propto \int_{q} \nu^{\epsilon}(dx) \mathbb{E}_{x}^{\epsilon} \left[\int_{0}^{\tau_{1}} \chi_{B}(X_{t}^{\epsilon}) dt \right] := \upsilon^{\epsilon}(B)$$
 (5.8)

La quantité dont nous aurons besoin pour la suite est donc fondamentalement la fonction W suivante.

Définition 5.3.7 (Fonction W) Pour tout ensemble ω -limite K_i , on définit

$$W(K_i) := \min_{g \in \mathcal{G}(\{i\})} \sum_{(m \to n) \in q} \tilde{V}(K_m, K_n)$$

$$(5.9)$$

Par ailleurs, on notera

$$W^{\star} = \min_{i=1...L} W(K_i)$$

Nous donnons un premier résultat sans preuve (voir [FW79]).

Proposition 5.3.3 Si on définit $V(K_i, K_j)$ par

$$V(K_i, K_j) := \inf \{V(x, y) \mid x \in K_i, y \in K_j\},$$

alors

$$W(K_i) = \min_{g \in \mathcal{G}(\{i\})} \sum_{(m \to n) \in g} V(K_m, K_n).$$

Ainsi, cette proposition assure qu'il n'est pas nécessaire d'éviter certains ensembles ω limites pour le calcul de $W(K_i)$ et que V peut se substituer à \tilde{V} . Nous en venons au théorème central de ce chapitre

Théorème 5.3.2 (Comportement de la mesure invariante) La suite de mesures $(\mu^{\epsilon})_{\epsilon \geqslant 0}$ satisfait un principe de grandes déviations : pour tout $\gamma > 0$, il existe des ρ_1 voisinages $\mathcal{V}_{\rho_1}(K_i)$ tels que si ϵ est assez petit :

$$e^{-\epsilon^{-1}[W(K_i)-W^{\star}+\gamma]} \leqslant \mu^{\epsilon}(\mathcal{V}_{o_1}(K_i)) \leqslant e^{-\epsilon^{-1}[W(K_i)-W^{\star}-\gamma]}$$
.

Ainsi, la mesure invariante $(\mu^{\epsilon})_{\epsilon \geqslant 0}$ charge principalement les ensembles K_i qui minimisent la fonction W, et le ratio avec les autres ensembles ω -limite est exponentiellement grand en ϵ^{-1} .

Preuve: Toute la construction du paragraphe 5.3.4 et les estimations du paragraphe 5.3.2 et 5.3.3 seront utilisées ici. Fixons nous un γ positif. On cherche à utiliser la formule donnant μ^{ϵ} en fonction de la mesure invariante de la chaine squelette ν^{ϵ} (donnée par v^{ϵ}). Prenons $\gamma' > 0$ qu'on calibrera en fonction de γ en fin de preuve. Nous savons que les transitions de cette chaine squelette satisfont d'après la proposition 5.3.1

$$\forall x \in q_i \qquad e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i, K_j) + \gamma']} \leqslant \mathbb{Q}(x, q_i) \leqslant e^{-\epsilon^{-1}[\tilde{V}(K_i, K_j) - \gamma']},$$

du moment que ρ_1 et ρ_0 sont choisis assez petit. On définit donc

$$p_{i,j} := e^{-\epsilon^{-1} [\tilde{V}(K_i, K_j)]},$$

et on constate que pour tout $\{i\}$ -graphe g:

$$\pi(g) = \prod_{(m,n)\in g} p_{m,n} = e^{-\epsilon^{-1}\sum_{(m,n)\in g} \tilde{V}(K_m,K_n)}$$

Un équivalent extrêmement simple montre alors que

$$Q_i = \sum_{g \in \mathcal{G}(\{i\})} \pi(g) \sim e^{-\epsilon^{-1} W(K_i)} n_i,$$

où n_i est le nombre de $\{i\}$ -graphes réalisant le minimum. Par ailleurs, on constate aussi que

$$\frac{Q_i}{\sum_{i=1}^L Q_i} \sim n_i' e^{-\epsilon^{-1} [W(K_i) - W^*]},$$

où n_i' est un réel minoré par 1 et majoré par L-1 qui dépend du fait de réaliser le minimum ou non. (C'est un détail mineur...) Nous en déduisons donc l'encadrement :

$$n_i' e^{-\epsilon^{-1} [\gamma'(L-1) + W(K_i) - W^*]} \le \nu^{\epsilon}(g_i) \le n_i' e^{-\epsilon^{-1} [-\gamma'(L-1) + W(K_i) - W^*]}$$

Nous regardons alors

$$\upsilon^{\epsilon}(g_i) = \int_{\partial g} \nu^{\epsilon}(dx) \mathbb{E}_x^{\epsilon} \left[\int_0^{\tau_1} \chi_{g_i}(X_t^{\epsilon}) \right] = \int_{\partial g_i} \nu^{\epsilon}(dx) \mathbb{E}_x^{\epsilon} \left[\int_0^{\tau_1'} \chi_{g_i}(X_t^{\epsilon}) \right].$$

La dernière égalité a lieu car on ne peut passer du temps dans g_i que si on part de g_i , et une fois qu'on a dépassé τ'_1 on ne peut plus passer de temps dans g_i . Par ailleurs, le Lemme 5.3.4 assure la minoration

$$\forall x \in g_i \qquad \mathbb{E}_x^{\epsilon} \left[\int_0^{\tau_1'} \chi_{g_i}(X_t^{\epsilon}) \right] \geqslant e^{-\gamma' \epsilon^{-1}},$$

et le Lemme 5.3.3 donne la majoration

$$\forall x \in g_i \qquad \mathbb{E}_x^{\epsilon} \left[\int_0^{\tau_1'} \chi_{g_i}(X_t^{\epsilon}) \right] \leqslant \mathbb{E}_x^{\epsilon} \left[\tau_1' \right] \leqslant e^{\gamma' \epsilon^{-1}}.$$

On peut donc constater que

$$n_i'e^{-\epsilon^{-1}[L\gamma'+W(K_i)-W^{\star}]} \leqslant v^{\epsilon}(q_i) \leqslant n_i'e^{-\epsilon^{-1}[-L\gamma'+W(K_i)-W^{\star}]}$$

Ainsi, en minorant par le terme où on réalise le minimum avec la fonction W:

$$v^{\epsilon}(M) \geqslant \sum_{i=1}^{L} v^{\epsilon}(g_i) \geqslant e^{-\epsilon^{-1}L\gamma'}.$$

Par ailleurs,

$$v^{\epsilon}(M) \leqslant \int_{\partial a} \nu^{\epsilon}(dx) \mathbb{E}_{x}^{\epsilon} \left[\tau_{1}' + (\tau_{1} - \tau_{1}') \right].$$

On utilise à nouveau la majoration de l'espérance de τ_1' par $e^{\gamma'\epsilon^{-1}}$ et ensuite la propriété de Markov forte associée au Lemme 5.3.4 nous montre que l'espérance du temps de retour dans g_i est bornée, c'est à dire il existe une constante C>0 telle que

$$\forall x \in g \qquad \mathbb{E}_x^{\epsilon} \mathbb{E}_{X_{\tau_1'}} [\tau_1 - \tau_1'] \leqslant C < +\infty.$$

Ainsi, on en déduit que pour ϵ assez petit :

$$v^{\epsilon}(M) \leqslant e^{\gamma' \epsilon^{-1}}.$$

En normalisant alors v^{ϵ} , on retrouve donc μ^{ϵ} la mesure de probabilités invariante et on obtient l'encadrement :

$$n_i e^{-\epsilon^{-1}[W(K_i) - W^* + (L+1)\gamma']} \le \mu^{\epsilon}(g_i) \le n_i e^{-\epsilon^{-1}[W(K_i) - W^* - (L+1)\gamma']}.$$

On termine alors la preuve en choisissant $\gamma'=(2L+2)^{-1}\gamma$, ϵ assez petit pour que les entiers n_i (compris entre 1 et L) soient mangés par $e^{-\epsilon^{-1}\frac{\gamma}{2}}$ et les tailles de voisinages nécessaires en découlent.

5.4 Un peu plus sur le quasi-potentiel

5.4.1 Motivations et difficultés

En réalité, nous venons de voir le rôle clef de l'évaluation des transitions entre les différents points au travers de la fonction V(x,y) où $x \in M$ et $y \in M$. C'est en effet

ce quasi-potentiel qui permet de calculer une fonction de taux dans le P.G.D. pour les mesures invariantes μ^{ϵ} .

Il est très difficile de discuter en toute généralité de la valeur de V, et les situations sont en général à prendre au cas par cas en fonction du drift b qui régit le système dynamique $\dot{x} = b(x)$.

Lorsque la situation devient dégénérée (c'est à dire lorsque la matrice de covariance devant la perturbation brownienne est non inversible), il convient de bien ajuster le problème de contrôle de trajectoire, mais ce qui a été vu dans la section précédente reste valable sous réserve de propriété de tension exponentielle pour assurer un P.G.D. en temps fini.

5.4.2 Équilibres instables

Le résultat suivant nous indique que dans la situation d'équilibres instables, ses compacts ne sont pas chargés par la mesure invariante.

Lemme 5.4.1 Si K_i est instable, alors il existe un équilibre stable K_j tel que $V(K_i, K_j) = 0$.

<u>Preuve</u>: On sait qu'il existe $x \notin K_i$ tel que $V(K_i, x) = 0$ puisque K_i est instable. On considère alors une courbe intégrale initialisée de x. Cette trajectoire atteint un ensemble ω -limite K_j . Par ailleurs, on sait que $V(K_i, K_j) = V(x, K_j)$. Si K_j est toujours instable, on sait que l'on peut poursuivre la même stratégie pour arriver à un compact stable.

On peut même démontrer le résultat suivant.

Proposition 5.4.1 Les deux propriétés sont satisfaites.

- i) Si K_i est un équilibre stable, on peut calculer $W(K_i)$ en se restreignant dans (5.9) aux équilibres stables comme états du graphe.
 - ii) Si K_i est instable, alors

$$W(K_j) = \min_{i} [W(K_i) + V(K_i, K_j)]$$

On n'effectuera pas la preuve de ce résultat qui exploite la structure d' $\{i\}$ -graphe. Cependant, on constatera que nécessairement le ii) prouve que le minimum de W ne peut être atteint que pour des compacts stables. C'est un résultat intuitif, mais qui mérite d'être signalé.

Enfin, on énonce le théorème donnant la valeur de la mesure invariante autour de n'importe quel point x.

Théorème 5.4.1 Définissons W sur M par

$$W(x) := \min_{i} [W(K_i) + V(x, K_i)]$$

où le minimum est pris sur tous les équilibres stables K_i du système $\dot{x} = b(x)$. Soit $\gamma > 0$, alors il existe une taille de voisinage $\rho > 0$ assez petite telle que pour ϵ assez petit :

$$e^{-\epsilon^{-1}[W(x)-W^{\star}+\gamma]} \leqslant \mu^{\epsilon}(\mathcal{V}_{\rho}(x)) \leqslant e^{-\epsilon^{-1}[W(x)-W^{\star}-\gamma]}$$

5.4.3 Equation de Kolmogorov

Dans la situation particulière de l'équation de Kolmogorov, on étudie

$$dX_t^{\epsilon} = --\nabla U(X_t^{\epsilon})dt + \sqrt{\epsilon}dB_t.$$

Le quasi-potentiel est alors donné par

$$V(x,y) = \inf_{T>0} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^T |\dot{z}(s) + \nabla U(z(s))|^2 ds, \quad z(0) = x \operatorname{et} z(T) = y \right\}.$$

Considérons deux points x et y de M. Nous cherchons à calculer V(x,y), donc à majorer et minorer sa valeur.

Nous savons que les attracteurs des ensembles K_i (ensemble ω -limite) forment une partition de M. Ainsi, il est toujours possible de joindre x à y en enchaînant un parcours explorant une suite de bassins d'attraction des différents équilibres $(K_i)_{i=1...l}$. La stratégie est donc de majorer et minorer le coût pour transiter d'un équilibre K_i à un autre K_j pour en déduire la valeur de V(x,y). Pour ce faire, il suffit de savoir contrôler le coût de transition entre deux équilibres K_i et K_j qui « communiquent ».

On sait enfin que partant de K_i , une fois atteint le bassin d'attraction de K_j , il suffit de laisser « descendre » le flot différentiel $\dot{z}_1 = b(z_1)$ pour atteindre K_j . Pour sortir d'un bassin d'attraction de K_i , une méthode optimale consiste à inverser le flot différentiel, c'est-à-dire à choisir un contrôle qui permet de remonter le temps dans $\dot{z} = -\nabla U(z)$. En effet : considérons φ le contrôle construit implicitement ainsi. Pour $\eta > 0$ assez petit, $x \in K_i$ et une direction de sortie $\overrightarrow{u} \in \mathcal{T}_x(M)$: on considère une trajectoire contrôlée x_{φ} solution de

$$\dot{x}_{\varphi}(t) = -\nabla U(x_{\varphi}(t))dt + \dot{\varphi}(t),$$

avec $\dot{x}_{\varphi}(0) = x \in K_i$ et

$$\forall s \in [0; \eta] : \dot{\varphi}(s) = \overrightarrow{u} \qquad \forall s \geqslant \eta : \qquad \dot{\varphi}(s) = 2\nabla U(x_{\varphi}(t)).$$

Il est facile de calculer le coût d'une telle trajectoire :

$$I_{T}(\varphi) = \frac{1}{2} \int_{0}^{T} |\dot{\varphi}(s)|^{2} ds = \frac{\eta}{2} ||\overrightarrow{u}|^{2} + 2 \int_{\eta}^{T} |\nabla U(x_{\varphi}(t))|^{2} dt.$$

Mais on sait aussi que dans ce cas, on a

$$\dot{x}_{\wp}(t) = -\nabla U(x_{\wp}(t)) + 2\nabla U(x_{\wp}(t)) = \nabla U(x_{\wp}(t)).$$

Ainsi,

$$I_T(\varphi) = \frac{\eta}{2} \|\overrightarrow{u}\|^2 + 2 \int_{\eta}^{T} \langle \dot{x}_{\varphi}(t), \nabla U(x_{\varphi}(t)) \rangle dt = \frac{\eta}{2} \|\overrightarrow{u}\|^2 + 2 \left[U(x_{\varphi}(T)) - U(x_{\varphi}(\eta)) \right].$$

En prenant la limite lorsque η tend vers 0, on constate que le coût limite de la trajectoire est

$$I_T(\varphi) = 2 \left[U(x_{\varphi}(T)) - U(x) \right].$$

Puis, lorsque T tend vers ∞ , on constate que le coût obtenu est égal à 2 fois l'élévation (au sens de U) du chemin ainsi formé entre le point col atteint et le point de départ.

En suivant une telle stratégie, on constate donc que l'on peut joindre tout point x de M à tout point y de M avec un coût qui est inférieur à la quantité suivante :

$$V(x,y) \le \inf_{\varphi:\varphi(0)=x,\,\varphi(\infty)=y} \left[\sup_t U(x_{\varphi}(t)) - U(x) \right].$$

Notons qu'en réalité, cette inégalité est une égalité en vertu de la remarque suivante : pour tout chemin φ joignant x à y, on a :

$$|\dot{\varphi}|^2 = |\dot{x}_{\varphi} + \nabla U(x_{\varphi})|^2 = |\dot{x}_{\varphi}|^2 + |\nabla U(x_{\varphi})|^2 + 2\langle \dot{x}_{\varphi}, \nabla U(x_{\varphi}) \rangle \geqslant 2\langle \dot{x}_{\varphi}, \nabla U(x_{\varphi}) \rangle.$$

Ainsi, quel que soit le chemin utilisé, le coût est toujours minoré par

$$I_T(x_{\varphi}) \geqslant 2 \int_0^{t^*} \langle x, \nabla U(x_{\varphi})(s) ds,$$

où on note t^* le point le plus haut (au sens du potentiel U) franchi par la trajectoire joignant x à y. Ce raisonnement permet alors de conclure à la proposition suivante.

Proposition 5.4.2 Pour la diffusion de Kolmogorov sur M, on a

$$V(x,y) = \inf_{\varphi:\varphi(0)=x,\,\varphi(\infty)=y} \left[\sup_t U(x_{\varphi}(t)) - U(x) \right].$$

Le lecteur intéressé consultera [FW79] pour un exemple plutôt contre-intuitif où le potentiel n'est pas continu, ce qui implique une étrangeté dans la concentration de la mesure $(\mu_{\epsilon})_{\epsilon \geqslant 0}$ lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$. De même Nous omettons dans ce chapitre la description de la décomposition de l'évolution en cycle de temps exponentiellement longs par rapport à ϵ et renvoyons à la section 6 du chapitre 6 de [FW79].

5.5 Description du spectre à basse température

5.5.1 Hypothèses

Processus Nous considérons à nouveau une diffusion Markovienne de drift b qui est elliptique, de générateur infinitésimal \mathcal{L}^{ϵ} :

$$\mathcal{L}^{\epsilon} = b(x)\partial_x + \frac{\sqrt{\epsilon}}{2}\Delta_x$$

L'opérateur \mathcal{L}^{ϵ} est réversible par rapport à sa mesure invariante μ^{ϵ} .

L'objectif est de décrire le comportement lorsque $\epsilon \mapsto 0$ du spectre de \mathcal{L}^{ϵ} . C'est bien sûr une question en soi qui est théoriquement intéressante, mais c'est aussi quelque chose qui a des applications pratiques importantes puisque nous avons vu chapitre 2 que parfois, ce spectre donne une information sur la vitesse de convergence à l'équilibre pour un opérateur auto-adjoint.

Espace d'états et hypothèse de rappel On considère à nouveau le cas où l'espace d'états M est compact. On considère dans M un ensemble D où le processus va passer la plupart de son temps, c'est-à-dire : lorsque le processus $(X_t)_{t\geqslant 0}$ n'est pas dans D, il y retourne avec des temps qui possèdent des moments exponentiels. Bien sûr, nous avons vu dans un paragraphe précédent (Lemme 5.3.5) que si on considérait un compact K ne contenant aucun ω -limit set, les temps de sortie de K possédaient des queues de distribution exponentiellement petites. Ainsi, l'ensemble D qui nous intéressera est celui qui contiendra tous les équilibres stables du drift b.

Par ailleurs, pour quantifier l'hypothèse de retour dans D, nous allons supposer l'existence d'une condition de Lyapunov.

 $(\mathbf{H_{RD}})$: Il existe une fonction W et $\alpha > 0$ telle que

$$\min_{M} W \geqslant 1 \quad \exists \epsilon_0 > 0 \quad \forall \epsilon < \epsilon_0 \qquad \mathcal{L}^{\epsilon} W \leqslant -\alpha W + b \mathbf{1}_D$$

Cette hypothèse n'est vraiment pas restrictive. En général, dès qu'on trouve une fonction de Lyapunov qui marche pour une certaine valeur de ϵ , elle marche encore mieux pour les ϵ plus petits.

Idée Nous allons procéder à une étude qui étudiera deux situations : soit le processus est dans D et le générateur possède dans D un trou spectral qu'on définira et évaluera, soit le processus vit dans le complémentaire de D et à nouveau, on connaîtra une asymptotique pour son trou spectral. Pour formaliser ces notions de « trou spectral » dans une zone ou une autre, il est impératif de raisonner plutôt en terme d'inégalités de Poincaré qu'en termes de fonctions propres de l'opérateur. Ceci en effet est moins difficile que de concevoir un raisonnement où l'on imposerait des contraintes sur ∂D aux fonctions tests manipulées.

Enfin, nous allons constater que la constante de Poincaré dans D est bien plus grosse, lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$ que celle associée à D^c . Ainsi, même si dans un premier temps notre majoration semblera grossière (voir section suivante), elle sera en réalité suffisante pour porter l'asymptotique de la première valeur propre de \mathcal{L}^{ϵ} sur M tout entier.

5.5.2 Inégalités de Poincaré et partition de l'espace

Nous allons étudier la faisabilité d'une inégalité de Poincaré sur M à partir d'inégalité de Poincaré sur D et D^c . Rappelons qu'on appelle inégalité de Poincaré le fait d'avoir l'existence d'une constante C_P vérifiant :

$$\forall f \in L^2(\mu)$$
 $Var_{\mu}(f) \leqslant C_P \int \Gamma(f, f) d\mu,$

et que dans ce cas, l'opérateur $-\mathcal{L}$ admet comme seconde plus petite valeur propre C_P^{-1} (voir chapitre 2). Une première relation est aisée entre les différentes constantes.

Proposition 5.5.1 Si la restriction de (\mathcal{L}, μ) à D (resp. D^c) satisfait une inégalité de Poincaré de constante C_P^D (resp. $C_P^{D^c}$), alors on a

$$C_P \geqslant C_P^D \vee C_P^{D^c}$$

<u>Preuve</u>: On considère une fonction f portée par D uniquement réalisant l'égalité dans l'inégalité de Poincaré, et on appelle $Z_D = \mu(D)$ (resp. $Z_D^c = \mu(D^c)$). On sait alors que $\mu_D := \mu 1_D/Z_D$ vérifie

 $Var_{\mu_D}(f) = C_P^D \int \Gamma(f, f) d\mu_D.$

Comme f est également une fonction de M (prolongée par 0 en dehors de D), on sait que :

 $Var_{\mu}(f) = C_P \int \Gamma(f, f) d\mu.$

Mais la variance de f pour μ est la même que celle pour μ_D . On en déduit alors que $C_P \geqslant C_P^D$. On procède de même pour le complémentaire de D.

Le sens opposé permettant de majorer la constante C_P par les constantes C_P^D et $C_P^{D^c}$ est nettement plus ardu. Nous allons considérer l'ensemble D_r défini par

$$D_r := \{ x \in M \mid d(x, D) < r \}.$$

Nous établissons alors le théorème suivant.

Théorème 5.5.1 (Cattiaux, Guillin) Si \mathcal{L} satisfait l'hypothèse de Lyapunov (\mathbf{H}_{RD}) ainsi qu'une inégalité de Poincaré de constante C_P^D sur D_r , alors \mathcal{L} satisfait une inégalité de Poincaré sur $M = D \cup D^c$ de constante C_P majorée par

$$C_P \leqslant \left(\frac{4}{\alpha} + C_P^D \left[M + 2\right]\right)$$

pour M ne dépendant que de D et r.

Preuve: La démonstration est en trois parties.

Étape 1 : Étant donné une fonction f de M suffisament régulière, et une constante c quelconque, on sait que

$$Var_{\mu}(f) \leqslant \int_{M} (f-c)^{2} d\mu,$$

puisque $Var_{\mu}(f)$ est l'infimum en c dans l'inégalité précédente. Nous allons exploiter $(\mathbf{H_{RD}})$ en remarquant que dans D, on sait que $-\mathcal{L}W \leq W$, ce qui se traduit également par $\frac{-\mathcal{L}W}{W} \leq 1$.

Étape 2 : Notons g = f - c, et remarquons alors que comme \mathcal{L} est réversible dans $L^2(\mu)$, on peut faire intervenir W « artificiellement » ainsi :

$$\langle -\mathcal{L}(W), \frac{g^2}{W} \rangle_{\mu} = -\langle W, \mathcal{L}\left(\frac{g^2}{W}\right) \rangle_{\mu}$$

Et bien sûr, en utilisant la relation $\mathcal{L}(h_1h_2) = \mathcal{L}(h_1)h_2 + \mathcal{L}(h_2)h_1 + 2\Gamma(h_1,h_2)$, on obtient

$$\mathcal{L}(g^2) = \mathcal{L}\left(\frac{g^2}{W} \times W\right) = \mathcal{L}\left(\frac{g^2}{W}\right)W + \mathcal{L}(W)\frac{g^2}{W} + 2\Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right).$$

Ainsi

$$\langle -\mathcal{L}(W), \frac{g^2}{W} \rangle_{\mu} = -\int \mathcal{L}(W) \frac{g^2}{W} d\mu$$

$$= \int \left[-\mathcal{L}(g^2) + \mathcal{L}\left(\frac{g^2}{W}\right) W + 2\Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right) \right] d\mu$$

$$= \int \left[\mathcal{L}\left(\frac{g^2}{W}\right) W + 2\Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right) \right] d\mu$$

$$= \langle \mathcal{L}\left(\frac{g^2}{W}\right), W \rangle_{\mu} + 2\int \Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right) d\mu$$

$$= \langle \mathcal{L}(W), \frac{g^2}{W} \rangle_{\mu} + 2\int \Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right) d\mu$$

On obtient donc:

$$\langle -\mathcal{L}(W), \frac{g^2}{W} \rangle_{\mu} = \int \Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right) d\mu = \int \nabla_x \left(\frac{g^2}{W}\right) \nabla_x W d\mu.$$

Puis, en calculant rapidement la forme de Dirichlet en utilisant son caractère de dérivation, on obtient

$$\begin{split} \Gamma\left(\frac{g^2}{W},W\right) &= \frac{g}{W}\Gamma(g,W) + g\Gamma\left(\frac{g}{W},W\right) \\ &= \frac{g}{W}\Gamma(g,W) + \frac{g}{W}\Gamma(g,W) + g^2\Gamma\left(\frac{1}{W},W\right) \\ &= 2\frac{g}{W}\Gamma(g,W) - \frac{g^2}{W^2}\Gamma(W,W). \end{split}$$

La dernière égalité a lieu tout simplement car

$$\Gamma\left(\frac{1}{W},W\right) = \nabla\left(\frac{1}{W}\right)\nabla W = -\frac{|\nabla W|^2}{W^2}.$$

Finalement, on en déduit en utilisant à nouveau $\Gamma(h_1, h_2) = \nabla h_1 \nabla h_2$ que

$$\Gamma\left(\frac{g^2}{W}, W\right) = -\left|\frac{g}{W}\nabla W - \nabla g\right|^2 + \Gamma(g, g) \leqslant \Gamma(g, g)$$

Étape 3 : On considère donc g = f - c et on va appliquer l'inégalité précédente. Considérons la fonction plateau notée χ qui est \mathcal{C}^{∞} de M telle que $\chi = 1$ sur D, $\chi = 0$ sur D_r^c et $0 \leq \chi \leq 1$. On a alors pour tout a > 0:

$$\begin{split} \int g^2 d\mu &= \int \left[g\chi + g(1-\chi) \right]^2 d\mu \\ &\leqslant \left[1+a \right] \int g^2 \chi^2 d\mu + \left[1+\frac{1}{a} \right] \int g^2 (1-\chi)^2 d\mu \\ &\leqslant \left[1+a \right] \int_{D_r} g^2 d\mu + \left[1+\frac{1}{a} \right] \int g^2 (1-\chi)^2 \frac{-LW}{\alpha W} d\mu \\ &\leqslant \left[1+a \right] \int_{D_r} g^2 d\mu + \frac{1}{\alpha} \left[1+\frac{1}{a} \right] \int \Gamma(g(1-\chi),g(1-\chi)) d\mu. \end{split}$$

On utilise à nouveau une majoration du double produit dans $\Gamma(h_1h_2)$ par

 $\Gamma(h_1 h_2) = h_1^2 |\nabla h_2|^2 + h_2^2 |\nabla h_1|^2 + 2h_1 h_2 \nabla h_1 \nabla h_2 \leqslant h_1^2 \nabla h_2^2 [1+b] + h_2^2 \nabla h_1^2, [1+1/b] \qquad \forall b > 0$ et comme $\chi \in [0,1]$, on obtient

$$\int \Gamma(g(1-\chi), g(1-\chi)) d\mu \le [1+b] (1-\chi)^2 \Gamma(g,g) + [1+1/b] g^2 \Gamma(\chi,\chi)$$

On pourrait sans doute chercher à optimiser en a et b ces inégalités, mais quoi qu'il en soit, en prenant brutalement a = b = 1, on obtient

$$\int g^2 d\mu \leqslant \frac{4}{\alpha} \int_{D^c} \Gamma(g,g) d\mu + \frac{4}{\alpha} \int_{D^c \cap D_r} \|\Gamma(\chi,\chi)\|_{\infty} g^2 d\mu + 2 \int_{D_r} g^2 d\mu$$
$$\leqslant \frac{4}{\alpha} \int_{D^c} \Gamma(g,g) d\mu + \frac{4}{\alpha} \left[\|\Gamma(\chi,\chi)\|_{\infty} + 2 \right] \int_{D_r} g^2 d\mu$$

On choisit alors c tel que $\mu_{D_r}(g)=0$ et on applique l'inégalité de Poincaré de constante C_P^D pour obtenir que

$$\int g^2 d\mu \leqslant \frac{4}{\alpha} \int_{D^c} \Gamma(g,g) d\mu + C_P^D \left[\| \Gamma(\chi,\chi) \|_{\infty} + 2 \right] \int_{D_r} \Gamma(g,g) d\mu.$$

Finalement, on en déduit que

$$Var_{\mu}(f) \leqslant \left(\frac{4}{\alpha} + C_P^D \left[\|\Gamma(\chi, \chi)\|_{\infty} + 2 \right] \right) \int \Gamma(g, g) d\mu.$$

Nous savons que pour \mathcal{L}^{ϵ} sur M, la première valeur propre λ_1^{ϵ} est donnée par l'inverse de la constante C_P , du fait de la symétrie de \mathcal{L}^{ϵ} dans $L^2(\mu_{\epsilon})$. Dans la suite, nous noterons $\lambda_{1,D}^{\epsilon}$ (resp. $\lambda_{1,D^c}^{\epsilon}$) la première valeur propre non nulle de $-\mathcal{L}^{\epsilon}$ dans $L^2(\mu_{\epsilon}^D)$ (resp. $L^2(\mu_{\epsilon}^{D^c})$), restriction à D des fonctions précédentes.

5.5.3 Estimation du spectre

La proposition 5.5.1 associée au théorème 5.5.1 montrent que

$$\frac{1}{\lambda_{1,D^c}^{\epsilon}} \vee \frac{1}{\lambda_{1,D}^{\epsilon}} \leqslant C_P^{\epsilon} := \frac{1}{\lambda_1^{\epsilon}} \leqslant \frac{4}{\alpha} + \frac{1}{\lambda_{1,D}^{\epsilon}} [M+2]$$

5.5.3.1 Représentation de la première valeur propre

Par ailleurs, on possède un moyen efficace pour étudier le comportement asymptotique de $\lambda_{1,D}^{\epsilon}$ et $\lambda_{1,D^c}^{\epsilon}$. On a en effet le résultat suivant :

Proposition 5.5.2 (Khas'minskii) Étant donné un domaine U compact de frontière ∂U régulière, ainsi qu'un opérateur elliptique L qui agit sur les fonctions positives, $C^{\infty}(U)$ nulles sur ∂U . Si on note $(X_t)_{t\geqslant 0}$ le processus de Markov de générateur L et si on note τ_U le premier temps de sortie de U, alors λ_1 la plus petite valeur propre de -L est donnée par

$$\lambda_1 = \sup \{ \beta > 0 \mid \mathbb{E}_x \left[e^{\beta \tau_U} \right] < \infty, \quad \forall x \in U \}.$$

La preuve est omise (il s'agit principalement d'appliquer la formule de Dynkin à $\mathbb{E}\left[e^{\lambda \tau_U}f(X_{\tau_U})\right]$) et pourra être consultée dans :

[K59] R. Z. Khas'minskii On Positive Solutions of the Equation $\mathfrak{A}U + VU = 0$, Theory of Probability & Its Applications 1959, Vol. 4, No. 3, pp. 309-318.

5.5.3.2 Étude sur D^c

L'utilisation de cette propriété permet alors de décrire le comportement de la première valeur propre $\lambda_{1,D^c}^{\epsilon}$ lorsqu'on est dans un domaine qui ne contient aucun ω -limit set pour le drift b. En réalité, le comportement semble assez limpide en vertu du résultat donné par le Lemme 5.3.5. En effet, nous savons que les queues de distribution du temps de sortie de D^c sont au plus exponentiellement petites :

$$\mathbb{P}_{x}^{\epsilon} \left[\tau_{D^{c}} \geqslant T \right] \leqslant C e^{-\epsilon^{-1} cT}$$

pour C une constante assez grande indépendante de ϵ et T. Ainsi, on sait que de nombreux moments exponentiels du temps τ_{D^c} sont intégrales :

$$\forall \beta < c\epsilon^{-1}$$
 $\mathbb{E}_x \left[e^{\beta \tau_{D^c}} \right] < +\infty.$

Cela prouve donc immédiatement que

$$\lambda_{1,D^c}^{\epsilon} \geqslant c\epsilon^{-1},$$

où c est donné par le Lemme 5.3.5. En réalité, on peut même être plus précis en vertu du résultat suivant énoncé sans démonstration.

Théorème 5.5.2 (Freidlin & Wentzell) Si D^c ne contient aucun ensemble ω -limite, alors

$$\lambda_{1,D^c}^{\epsilon} = [c_1 + o(1)]\epsilon^{-1}, \quad lorsque \quad \epsilon \longrightarrow 0,$$

avec

$$c_1 = \lim_{T \to +\infty} \frac{1}{T} \min \left\{ I_T(\varphi) \mid \varphi(s) \in D^c, \forall s \in [0, T] \right\}.$$

Notons que lorsque le drift b dérive d'un potentiel U, c'est-à-dire lorsque $b = -\nabla U$, la constante c_1 est connue explicitement, et on peut démontrer qu'alors

$$c_1 = \min_{x \in D^c} \frac{1}{2} \|\nabla U(x)\|^2.$$

Cela correspond en réalité à trouver le point x dans D^c pour lequel il est le moins couteux de rester stationnaire. Cette stationnairé est obtenue bien sûr en choisissant un contrôle $\varphi = +\nabla U(x)$. Le coût d'un tel contrôle est alors $T/2\|\nabla U(x)\|^2$. Par ailleurs, on constatera que la constante de Poincaré dans le secteur D^c est alors très petite :

$$C_P^{D^c} \sim 2\epsilon \max_{x \in D^c} \|\nabla U(x)\|^{-2}.$$

Ceci est évidemment d'autant plus petit que le potentiel U est bien« coercif » en dehors de ses minima.

5.5.3.3 Étude sur *D*

Nous allons voir que si le temps de sortie de D^c est très court, il n'en est absolument rien du temps de sortie de D. Cela implique donc des asymptotiques très différentes pour $\lambda_{1,D^c}^{\epsilon}$ et $\lambda_{1,D}^{\epsilon}$ lorsque $\epsilon \longrightarrow 0$. Nous avons vu précédemment que dans l'ensemble D, le système dynamique est très proche, lorsque ϵ est petit, de la dynamique d'une chaine de Markov à espaces d'états finis, dont les transitions sont données par

$$p_{i,j} := e^{-\epsilon^{-1}\tilde{V}(K_i, K_j)}$$

ou éventuellement

$$p_{i,\infty} := e^{-\epsilon^{-1}\tilde{V}(K_i,\partial D)}$$

Nous allons donner une dernière définition.

Définition 5.5.1 $\mathcal{G}(k)$ désigne l'ensemble des graphes orientés sur $\{K_1, \ldots, K_l, \partial D\}$ dont l'état terminal est un sous-ensemble de taille k. On définit alors

$$V^{(k)} = \min_{g \in \mathcal{G}(k)} \sum_{m \to n \in g} \tilde{V}(m, n).$$

On peut alors énoncer le théorème suivant.

Théorème 5.5.3 (Wentzell, 1973) La valeur propre $\lambda_{1,D}^{\epsilon}$ de $-\mathcal{L}^{\epsilon}$ est logarithmiquement équivalente à

$$\lambda_{1,D}^{\epsilon} \sim e^{-\epsilon^{-1}[V^{(1)}-V^{(2)}]}.$$

Plus généralement, les autres valeurs propres sont telles que

$$\lambda_{i,D}^{\epsilon} \sim e^{-\epsilon^{-1}[V^{(i)}-V^{(i+1)}]}.$$

En particulier, ce théorème dit que la constante de Poincaré est beaucoup plus grosse sur D que sur D^c puisque cette fois :

$$C_P^D \sim e^{\epsilon^{-1}[V^{(1)} - V^{(2)}]} >> \epsilon.$$

Ainsi, nous avons obtenu un théorème un peu plus général en utilisant le théorème 5.5.1 puisque la constante de Poincaré C_P^D prend le pas sur $C_P^{D^c}$ lorsque ϵ est petit. Ainsi :

Théorème 5.5.4 Si \mathcal{L}^{ϵ} est un générateur infinitésimal elliptique sur M défini par (??), et tel que M contient au moins un équilibre stable pour b, alors la première valeur propre non nulle de $-\mathcal{L}^{\epsilon}$ vérifie

$$\lambda_1^{\epsilon} \sim e^{-\epsilon^{-1}[V^{(1)} - V^{(2)}]}.$$
 (5.10)

On peut par ailleurs donner une expression plus explicite de ce trou spectral lorsque le drift b dérive d'un potentiel et que le processus suit une équation de Kolmogorov. Dans ce cas, on peut travailler un peu l'expression donnée dans [?] puisque nous avons vu dans le paragraphe 5.4.3 que les termes V étaient plus explicites qu'il n'y parait. Notons enfin que le travail

[HKS89] R.A. HOLLEY, S. KUSUOKA, D.W. STROOCK Asymptotics of the Spectral Gap with Applications to the Theory of Simulated Annealing, Journal of Functional Analysis, 83, 333-347.

retrouve l'asymptotique du trou spectral en utilisant une formulation variationnelle associée à la première valeur propre. Théorème 5.5.5 (Wentzell, 1973, Holley, Kusuoka, Stroock 1989) Si U est un potentiel de minimum 0 sur M tel que $b = -\nabla U$ et si H(x,y) est défini par l'élévation minimale pour joindre x à y:

$$H(x,y):=\inf\{\max_{t\in[0,1]}U(\varphi(t)),\varphi(0)=x,\varphi(1)=y\},$$

alors

$$\lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \log \lambda_1^{\epsilon} = -m,$$

 $o\dot{u} \ m = \max_{x,y} [H(x,y) - U(x) - U(y)].$

5.5.3.4 Retour sur le recuit simulé

Il est relativement tentant de revenir alors à l'étude d'un algorithme stochastique exploitant la propriété de minimisation globale de U au travers du comportement asymptotique de μ_{ϵ} . Nous renverons aux travaux

[M92] L. MICLO Recuit simulé sur \mathbb{R}^n . Étude de l'évolution de l'énergie libre, Annales de l'Institut Henri Poincaré (B), 28 (2), 235-266.

pour une étude étudiant l'évolution conjointe de $\epsilon(t) \longrightarrow 0$ avec le processus $(X_t^{\epsilon(t)})_{t \geqslant 0}$.

Cependant, de par sa nature symétrique, le semi-groupe basé sur \mathcal{L}^{ϵ} possède une convergence exponentielle donnée par sa constante de Poincaré C_P^{ϵ} et la convergence de μ_t^{ϵ} vers μ^{ϵ} est en

$$v_{\epsilon}(t) := e^{-2t\lambda_1^{\epsilon}} = e^{-2te^{-\epsilon^{-1}m}}.$$

Ainsi, lorsque ϵ tend vers 0, le temps caractéristique pour faire baisser la norme 2 (et également l'entropie) entre μ_t^{ϵ} et μ^{ϵ} est en $e^{\epsilon m}$. Si l'on procède alors à un schéma de décroissance de température ϵ par palier, en choisissant par exemple $\epsilon_k = k^{-1}$, on constatera que le temps admissible pour le palier k est en $T_k = e^{mk}$.

À l'inverse, au temps de l'algorithme $t = T_1 + \dots T_k \sim e^{mk}$, la variance ϵ correspond à 1/k, c'est à dire

$$\epsilon(t) = \frac{m}{\log t}.$$

Précisément, un résultat établi dans [M92] en version « évolution continue » (par opposition à évolution par palier) de $t \mapsto \epsilon(t)$ en $c \log(t)^{-1}$ avec c > m assure la convergence de $(X_t^{\epsilon(t)})_{t \geq 0}$ vers le minimum global de U.