Algorithme d'Hastings-Metropolis - Problème du voyageur de commerce

PEROTTINO Tony, LE BER Tom,
VAILLANT Corentin et BERNARD Léo

16 mai 2025

Table des matières

Remerciements

Pour réaliser ce projet de la licence de mathématiques sur l'algorithme d'Hastings-Metropolis et le problème du voyageur du commerce (C7), nous souhaitons remercier :

— **Monsieur Clement Pellegrini**, enseignant-chercheur au sein de l'Institut de Mathématiques de Toulouse pour avoir proposé ce sujet de recherche, nous avoir fourni des sources nous permettant de nous initier à la théorie des chaînes de Markov et à l'algorithme d'Hastings-Metropolis et nous avoir encadré tout au long de ce projet.

— **Monsieur Olivier Thual**, enseignant-chercheur à l'Institut National Polytechnique de Toulouse au sein de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse pour avoir relu la partie mathématiques de notre rapport, nous permettant de corriger plusieurs notations mathématiques non homogènes.
De plus, monsieur Thual nous a fait découvrir la plateforme Google Collaboration nous permettant ainsi de partager de manière interactive sur cette plateforme un document Jupyter Notebook, contenant notre implémentation de l'algorithme d'Hastings-Metropolis présentée dans ce rapport.

— **Madame Alexane Jouniaux**, doctorante en mathématiques appliquées à la biologie à l'INSA de Toulouse, pour avoir relu et proposé différentes améliorations de la démonstration de l'égalité $\pi P^n = \pi$ dans le cadre de l'étude des chaînes de Markov.

— **Monsieur Pierre Maréchal**, enseignant-chercheur au sein de l'Institut de Mathématiques de Toulouse pour nous avoir expliqué et fait comprendre le théorème ergodique.

Préambule

Ce rapport s'inscrit dans le cadre de la matière "Projet de Mathématiques" de l'Université de Toulouse (Paul Sabatier).
L'objectif de ce rapport est de présenter et de prouver l'algorithme d'Hastings-Metropolis, et la théorie mathématique qui en découle. Notre but est d'expliquer en détail son fonctionnement, mais aussi de comprendre l'intérêt qu'il présente dans les sciences et en quoi il prend sa valeur. Pour illustrer l'algorithme, nous nous intéresserons au problème du voyageur de commerce.

1 Introduction

Afin de comprendre en profondeur ce sujet, il est nécessaire de s'en faire une idée globale, même naïve, pour pouvoir suivre convenablement la ligne directrice de notre discours.

1.1 Informations générales et description historique

L'algorithme d'Hastings-Metropolis (abrégé par "HM" dans ce rapport) consiste en une méthode d'échantillonnage stochastique permettant de générer des échantillons représentatifs d'une distribution de probabilité donnée. L'objectif est de pouvoir décrire le comportement de la distribution à l'aide de statistiques générés par l'étude des échantillons. Cet algorithme prend sa valeur quand la distribution est difficile à analyser (systèmes multidimensionnels, par exemple) et permet de résoudre de nouveaux problèmes avec une complexité temporelle décente.
Cette méthode est marquante, car elle a été conceptualisée tôt dans l'histoire de l'informatique et a mis des décennies avant d'être prouvée et expliquée entièrement.

Historiquement, c'est en 1949 que l'écriture de l'algorithme a été publiée dans un article de Nicholas Metropolis et Stanisław Ulam. La paternité de l'algorithme est soumise à débat, car l'algorithme s'inscrit sous le nom de son chef de projet (Metropolis), alors que l'équipe composée de Nicholas Metropolis, Arianna et Marshall Rosenbluth, Augusta et Edward Teller a contribué à cette méthode. Ils étudiaient alors plus particulièrement le cas de la distribution de Boltzmann, une des distributions les plus utilisées en physique statistique, dans des travaux datant de 1953.
Cela illustre une dynamique fréquente dans les sciences, où le mérite est disproportionnellement attribué à une personne alors qu'il s'agit des efforts de toute une équipe. En particulier, Arianna Rosenbluth était considérée comme brillante par le monde scientifique.

En 1970, W. K. Hastings (1930-2016) a étendu l'algorithme au cas d'une distribution quelconque, et c'est cette version généralisée qui est connue sous le nom d'algorithme d'Hastings-Metropolis. Cette extension a eu de nombreuses applications dans divers domaines scientifiques, comme en statistique bayésienne (espaces complexes multidimensionnels), en biologie computationnelle (analyse des séquences génétiques), en économie et en finance (modèles stochastiques MCMC en général), etc.

Quant à lui, le problème du voyageur de commerce (dit "TSP", comme Travelling Salesman Problem en anglais) est un problème classique et bien connu pour être un problème NP-difficile, ce qui signifie qu'il n'existe actuellement aucune méthode connue capable de le résoudre de manière optimale en temps polynomial pour toutes les tailles d'instances, et qu'il est au moins aussi difficile que les problèmes de NP. L'origine du problème est assez incertaine : il a été formulé pour la première fois vers 1850 dans un manuel d'un commerçant voyageant en Suisse et en Allemagne. Ce n'est que dans les années 1930 que le problème fut énoncé d'abord comme un casse-tête (par William Rowan et Thomas Kirkman), puis étudié (par, entre autres, Thomas Kirkman, Jillian Beardwood, J. H. Halton et John Hammersley).

Le problème consiste à déterminer le chemin le plus court passant par tous les points d'un graphe une seule fois chacun, en terminant par le point de départ (recherche d'un cycle hamiltonien le plus court). Les distances peuvent être dites symétriques ou asymétriques, c'est-à-dire que la distance entre eux varie en fonction de la direction du déplacement. On peut illustrer ce problème grâce à un voyageur de commerce devant vendre ses produits dans chacune des villes en un minimum de temps. Ce problème peut donc être naturellement représenté par un graphe.

1.2 Pourquoi HM permet-il de résoudre le problème du voyageur de commerce ?

Le principe mathématique derrière HM repose sur la construction dynamique d'une chaîne de Markov, qui n'est pas connue au préalable mais se développe au fil des itérations. À mesure que l'algorithme progresse, le comportement de cette chaîne converge vers la distribution cible, permettant d'obtenir un échantillon fiable de solutions par rapport aux états de la distribution.
Quant au problème du voyageur de commerce, il peut être représenté par un graphe orienté ayant un sommet pour chaque ville et une arête pour chaque temps de trajet. Nous verrons par la suite qu'une chaîne de Markov peut être associée à un graphe orienté, c'est-à-dire que le problème du voyageur de commerce est résoluble par HM.
Par résoluble, il est important de préciser qu'il s'agit d'une résolution approximative parce que le TSP est NP-difficile comme mentionné précédemment. En conséquence, l'objectif de HM n'est pas d'apporter la réponse exacte au problème, mais une approximation fiable de la solution, ce qui peut sembler contre-intuitif. Cette approximation est la caractéristique principale des méthodes MCMC que nous aborderons dans leur partie dédiée.

Il convient de souligner que, dans le cas du TSP, c'est la version d'optimisation qui nous intéresse, par opposition au problème décisionnel, qui, lui, est NP-complet. La différence entre ces deux formulations repose sur leur objectif : dans le TSP décisionnel, on pose une question du type "Existe-t-il un chemin de coût inférieur ou égal à une valeur donnée ?", à laquelle il s'agit de répondre par oui ou non. Alors que le TSP d'optimisation cherche à partir de la situation initiale la meilleure solution : donc optimiser le chemin au fil des itérations. C'est cette version du problème pour laquelle l'approche par échantillonnage stochastique est envisageable. Précisons toutefois que HM n'est habituellement pas la méthode que l'on utilise pour le TSP en pratique. Usuellement, le nombre de ville étant grand (suffisamment pour que la solution par brute force ne soit pas trouvable) mais pas absurde (une centaine par exemple), on préfère utiliser des versions déterministes optimisées comme l'algorithme de Held-Karp de complexité $O(2^n \times n^2)$, ou dans le cas de situation avec encore plus de villes, des méthodes similaires à HM plus adaptées comme l'échantillonnage de Gibbs.

En somme, il est important de comprendre que HM est un outil adapté à la résolution de problèmes dont l'espace des solutions est trop vaste pour être exploré exhaustivement dans un temps raisonnable. C'est donc par l'approximation de la solution optimale, à travers des échantillons, que cette méthode permet de trouver une solution satisfaisante. Cette nuance est essentielle, car elle met en lumière la sophistication de HM en tant qu'outil d'approximation pour des problèmes complexes.

1.3 Objectif de ce rapport

L'objectif de ce rapport étant d'apporter une solution fiable au TSP grâce à HM, nous prouverons alors le fonctionnement de ce dernier grâce à la théorie mathématique des chaînes de Markov. Nous en expliciterons les définitions et propriétés fondamentales dans un premier temps, qui permettront de prouver l'algorithme d'HM dans un second temps. Nous présenterons alors à la fin du rapport une implémentation personnelle de l'algorithme.

2 Chaînes de Markov à états finis

2.1 Définitions fondamentales

Temps Discret et Temps Continu

Soit T un ensemble d'indices numérotées représentant le temps.

Il existe deux types de modélisation temporelle :

(1) Un processus **à temps discret** signifie que l'on considère les valeurs de la modélisation comme espacées régulièrement dans le temps. On peut prendre des ensembles dénombrables comme $T = \mathbb{N}$ ou $T = \mathbb{Z}$ où chaque instant est distinct.

(2) Un processus **à temps continu** signifie que T n'est pas dénombrable. Il existe toujours un temps intermédiaire entre deux indices de T. Cela signifie que le processus évolue en tout instant dans un continuum temporel, on peut prendre des ensembles non dénombrables comme $T = \mathbb{R}_+$ où chaque instant est continu.

Dans ce rapport nous nous intéresserons uniquement au temps discret, pour pouvoir modéliser le problème du voyageur de commerce. De plus, cette distinction joue un rôle fondamental dans la classification et l'analyse des **processus stochastiques** et n'implique pas les mêmes théorèmes.

Processus Stochastique

Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité.
Soit T un ensemble d'indices discret ou continu (souvent $T = \mathbb{N}$ ou $\mathbb{R}_+$).

Un **processus stochastique** est une famille de variables aléatoires $\{X_t\}_{t \in T}$ définies sur $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ et à valeurs dans un espace d'états E (appelé espace d'états du processus).

Un processus stochastique permet de modéliser un système évoluant de manière aléatoire en fonction du temps.

Différents types de processus peuvent être étudiés en fonction des propriétés de dépendance temporelle et de la nature de l'espace d'états E. Au cours de ce rapport, nous nous concentrerons l'un des principaux processus stochastiques à temps discret et à espace d'états fini ; les **chaînes de Markov**.

Chaîne de Markov

Soit E un ensemble fini ou dénombrable.
Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires à valeurs dans l'espace d'états E.

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

(1) La loi de probabilité initiale de X_0 est bien définie.

(2) Elle respecte la **propriété de Markov**, telle que :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \forall x_0, x_1, \ldots, x_{n+1} \in E,$$

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_0 = x_0, \ldots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n).$$

Une chaîne de Markov est un processus de Markov à temps discret et à espace d'états discret.

Un processus de Markov est un processus stochastique possédant la propriété de Markov : l'information utile pour la prédiction du futur est entièrement contenue dans l'état présent du processus et n'est pas dépendante des ses états antérieurs.

Autrement dit, la loi de probabilité $\mathbb{P}$ régissant la transition de l'état présent X_n vers l'état futur X_{n+1} dépend uniquement du dernier terme X_n, et reste totalement indépendante des tous ses états antérieurs $\{X_0, X_1, \ldots, X_{n-1}\}$.

Cette propriété, que l'on peut qualifier de « sans mémoire » ou de propriété de Markov, constitue la caractéristique fondamentale de ces processus stochastiques.

Chaine de Markov Homogène

Une chaîne de Markov est dite homogène quand $\forall n \in \mathbb{N}$, $\forall i, j \in E$:

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

En somme, une chaîne de Markov homogène ne dépend pas des états précédents (propriété de Markov) et garantit que son comportement reste inchangé au fil du temps, c'est-à-dire que les probabilités de transition restent constantes quelque doit $t \in T$ (homogénéité de la chaîne de Markov).

Dans ce rapport, toutes les chaînes de Markov seront considérées comme homogènes.

2.2 Propriétés fondamentales

2.2.1 Matrice de Transition

Matrice de Transition

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène à temps discret à valeurs dans un espace d'états E, fini ou dénombrable.

$(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est entièrement caractérisée par sa **matrice de transition** $P = (P_{i,j})_{i,j\in E}$, où chaque terme représente la probabilité de passer de l'état i à l'état j en une étape :

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

Lorsque l'ensemble des états E est fini, par exemple $E = \{1, 2, \dots, N\}$, la matrice P s'écrit sous la forme :

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

Matrice stochastique par lignes/colonnes

Une matrice **stochastique par lignes** (appelée aussi **stochastique à droite**) est une matrice dont la somme des probabilités de ses lignes vaut 1 chacune et toutes ses probabilités sont positives :

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

Respectivement, une matrice est **stochastique par colonnes** (dite aussi **stochastique à gauche**) lorsque :

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

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

Dans le cadre des chaînes de Markov homogènes, toutes les matrices de transition P sont stochastiques par lignes car les probabilités de transition depuis chaque état sont normalisées (chaque ligne représentant le vecteur des probabilités de transition depuis un état donné vers l'ensemble des autres états). C'est-à-dire que la somme des probabilités pour passer d'un état à un autre vaut 1.

De manière analogue, si l'espace des états est infini dénombrable (par exemple $E = \{1, 2, 3, \dots\}$), on indexe les états de la même façon et la condition suivante reste valable :

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

2.2.2 Représentation sous forme de Graphe Orienté

Graphe Orienté d'une Chaîne de Markov

Une chaîne de Markov homogène peut toujours être représentée sous forme d'un graphe orienté $G = (V, A)$, où :

(1) V est l'ensemble des sommets, correspondant à l'ensemble des états de l'espace d'états E.

(2) A est l'ensemble des arcs, où chaque arc possède une pondération correspondant à la probabilité de transition $P_{i,j}$. Un arc de i vers j est représenté que si $P_{i,j} > 0$.

Représenter graphiquement une chaîne de Markov homogène permet de clarifier visuellement les différentes dynamiques de transitions entre chaque état du système et de comprendre la structure du processus stochastique.

Exemple

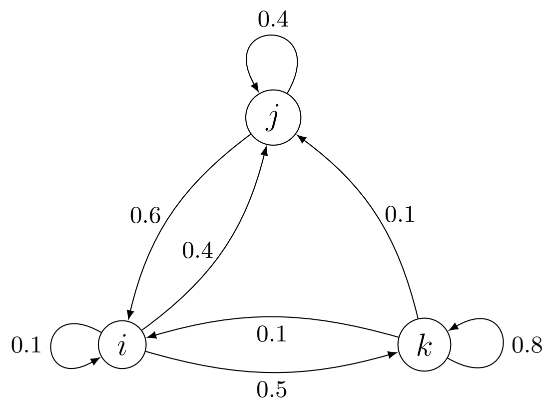
Considérons par exemple une chaîne de Markov ayant trois états i, j, k, ordonnés respectivement, et dont la matrice de transition est donnée par :

$$P = \begin{bmatrix} 0,1 & 0,4 & 0,5 \\ 0,6 & 0,4 & 0,0 \\ 0,1 & 0,1 & 0,8 \end{bmatrix}$$

Dans cette configuration, par exemple, la probabilité de transition de l'état 1 vers l'état 2 est donnée par :

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

Nous obtenons ainsi le graphe suivant :



2.2.3 Matrice de transition en k-pas

Matrice de transition pour k-transitions

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

Pour tout état E_i et E_j et pour tout entier naturel $k \geq 1$, le coefficient de la ligne i et de la colonne j de **la matrice P^k est la probabilité de passer de l'état E_i à celui E_j en k transitions**.

Les chaînes de Markov homogènes permettent de déterminer l'état d'un système après k transitions, c'est-à-dire au bout du k-ième mouvement dans la chaine, en élevant la matrice de transition à la puissance k.
Plus formellement, on a :

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

Ce résultat vient de la propriété de Markov, qui indique que la probabilité de transition d'un état i à un état j dépend uniquement du dernier pas réalisé, et non de tous les précédents.

Démonstration

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

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

Ce qui équivaut en termes matriciels :

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

Cette relation peut s'interpréter en disant que pour passer de i à j en $n+m$ étapes, il a fallu en n étapes aller de i à un certain k puis en m étapes aller de k à j.
On reconnaît alors l'expression de l'associativité du produit matriciel tel que :

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

Exemple

Reprenons par exemple la matrice P donnée dans la sous-section 2.2.2 ci-dessus, la matrice de transition en 5 étapes, nommée P^5, représente l'ensemble des probabilités permettant de passer de chaque état i à un état j au bout d'exactement 5 étapes :

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

Toujours en reprenant notre exemple, la probabilité de passer de l'état 1 à l'état 2 au bout d'exactement 5 étapes est donc de :

$$P_{1,2}^{(5)} = \mathbb{P}(X_{k+5} = 1 \mid X_k = 2) = 24,385\%$$

2.3 Classes d'équivalence

2.3.1 Classification des états

Dans une chaîne de Markov, chaque état peut être classifié en différentes catégories en fonction de ses liaisons avec les autres états. Ces différentes classifications nous permettrons d'analyser le comportement de la chaîne en temps long.

Accessibilité et communication

Soient i et j deux éléments de E. On dit que j est **accessible** à partir de i et on note $i \to j$ si :

$$\exists n \in \mathbb{N}^*, \quad P_{i,j}^{(n)} > 0.$$

Autrement dit, il existe une suite finie d'états $k_1, \ldots, k_{n-1} \in E$ tels que :

$$P_{i,k_1} \cdot P_{k_1,k_2} \cdot \ldots \cdot P_{k_{n-1},j} > 0.$$

Ce qui signifie qu'il existe un chemin de probabilité strictement positive qui mène de i à j.

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

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

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

État récurrent/transient

Un état i est dit **récurrent** si, en partant de cet état, il est certain d'y retourner en un nombre fini de pas. Un état non récurrent est dit **transient**.

On considère la variable :

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

On défini $\mathbb{P}_i(\cdot) = \mathbb{P}(\cdot \mid X_0 = i)$.
Ainsi, i est récurrent si :

$$\mathbb{P}_i(\tau_i < +\infty) = 1$$

Et i est transient si :

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

État périodique/apériodique

On défini la période $d(i)$ d'une chaîne de Markov de transition P comme étant le nombre

$$d(i) = \text{PGCD}\{n \in \mathbb{N}^* \mid P_{i,i}^{(n)} > 0\}.$$

Un état i est dit **périodique** si la chaîne ne peut revenir à cet état qu'après un nombre d'étapes multiple (un certain entier $d > 1$), appelé la période de i.
Si $d(i) = 1$, l'état i est dit **apériodique**, ce qui signifie qu'il est possible de revenir à cet état à chaque nouvelle transition / sans contrainte de périodicité.

2.3.2 Estimation du nombre de visites d'un état

Formule du nombre de visite d'un état

Soit $i \in E$. On pose $N_i \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ le nombre de visites de l'état i par :

$$N_i = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \mathbb{1}_{\{X_n = i\}}.$$

Où

$$\mathbb{1}_{\{X_n = i\}} = \begin{cases} 1 \text{ si } X_n = i \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Exemple (Application de N_i à l'espérance)

Soit $i, j \in E$. On a alors :

$$\mathbb{E}(N_j \mid X_0 = i) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \mathbb{P}(X_n = j \mid X_0 = i) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} P_{i,j}^{(n)}.$$

Formule de récurrence conditionnelle (admise)

Soit $i, j \in E$. $\forall n \in \mathbb{N}$, on a alors :

$$\mathbb{P}(N_j \geq n+1 \mid X_0 = i) = \mathbb{P}(\tau_j < +\infty \mid X_0 = i)\mathbb{P}(N_j \geq n \mid X_0 = j).$$

Propriétés équivalentes des états récurrents/transients

Les conditions suivantes sont équivalentes :

- L'état i est récurrent.
- $\mathbb{P}(N_i = +\infty \mid X_0 = i) = 1$.
- $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} P_{i,i}^{(n)} = +\infty$.

Les conditions suivantes sont équivalentes :

- L'état i est transient.
- $\mathbb{P}(N_i = +\infty \mid X_0 = i) = 0$.

  Selon la propriété précédente, on en déduit que :

  $$\mathbb{P}(N_i \geq n+1 \mid X_0 = i) = \mathbb{P}(\tau_i < +\infty \mid X_0 = i)\mathbb{P}(N_i \geq n \mid X_0 = i)$$

  Donc, si $X_0 = i$, N_i suit une loi géométrique de paramètre $p = \mathbb{P}(\tau_i < +\infty \mid X_0 = i)$.
  Autrement dit :

  $$\mathbb{P}(N_i \geq n \mid X_0 = i) = \big(\mathbb{P}(\tau_i < +\infty \mid X_0 = i)\big)^n$$

- $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} P_{i,i}^{(n)} < +\infty$.

Ces propriétés impliquent que si l'état i est récurrent (respectivement transient), on y retournera un nombre infini (respectivement fini) de fois pour une infinité de transitions.

2.3.3 Classes de communication

Classe de communication

Soit deux états communicants i et j. Selon la définition précédente, on a que $\leftrightarrow$ est une relation d'équivalence. De plus dans le contexte des chaînes de Markov, ces classes d'équivalences sont appelées **classes de communications**. Une classe de communication est donc un ensemble d'états accessibles les uns depuis les autres.

Démonstration

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

Il nous suffit alors de vérifier les trois propriétés suivantes :

1. **Réflexive** : $\forall i \in E,\ i \leftrightarrow i$.
   Soit P la matrice de transition de la chaîne de Markov. Comme $P^{(0)} = I_{|E|}$, en prenant le chemin de longueur zéro on a $P_{i,i}^{(0)} = 1 > 0$.
   Donc trivialement $\forall i \in E,\ i \leftrightarrow i$.
2. **Symétrique** : $i \leftrightarrow j \Rightarrow j \leftrightarrow i$.
   Si $i \leftrightarrow j$, par définition les chemins $i \to j$ et $j \to i$ existent.
   Donc par définition, $i \leftrightarrow j \Rightarrow j \leftrightarrow i$.
3. **Transitive** : $i \leftrightarrow j$ et $j \leftrightarrow k \Rightarrow i \leftrightarrow k$.
   Comme $i \leftrightarrow j$ et $j \leftrightarrow k$, il existe n_1 et $n_2 \in \mathbb{N}$ tel que $P_{i,j}^{(n_1)} > 0$ et $P_{j,k}^{(n_2)} > 0$.
   Alors :
   $$P_{i,k}^{(n_1+n_2)} = \sum_{w \in E} P_{i,w}^{(n_1)} \cdot P_{w,k}^{(n_2)} \geq P_{i,j}^{(n_1)} \cdot P_{j,k}^{(n_2)} > 0$$
   Autrement dit, il existe un chemin $i \to k$ de longueur n_1+n_2. Par un raisonnement analogue, on en déduit qu'il existe également un chemin $k \to i$, de même longueur.
   Donc $i \leftrightarrow j$ et $j \leftrightarrow k \Rightarrow i \leftrightarrow k$.

La relation $\leftrightarrow$ satisfait les propriétés de réflexivité, de symétrie et de transitivité. C'est donc une relation d'équivalence sur E.
Les classes d'équivalences ainsi obtenues sont alors appelées **classes de communication** de la chaîne de Markov.

L'ensemble des classes de communication, engendrées par $\leftrightarrow$, d'une chaîne de Markov sont **disjointes** et forment une **partition** de l'ensemble des états de cette chaîne. Autrement dit, la relation d'équivalence $\leftrightarrow$ partitionne l'ensemble des états d'une chaîne de Markov en classes de communication disjointes.

Propriétés de classe

On appelle **propriété de classe** une propriété structurelle commune à tous les états d'une même classe de communication.

Les propriétés de récurrence ou transience d'un état, énoncées dans la partie 2.3.1 sont des propriétés de classe.

Cela signifie donc qu'au sein d'une même classe de communication, tous les états sont soit récurrents, soit transients. On parle alors de classes de récurrence ou de transience.

L'intérêt de ces distinctions est de diviser les chaînes de Markov en sous-ensembles analytiquement indépendants, ce qui permet ensuite de tirer des conclusions sur les sous-ensembles présentant ces propriétés.

Chaîne de Markov irréductible

Une chaîne de Markov est dite **irréductible** si elle ne contient qu'une seul classe d'équivalence. Cela revient à étudier le graphe qui lui est associé, étant alors fortement connexe.

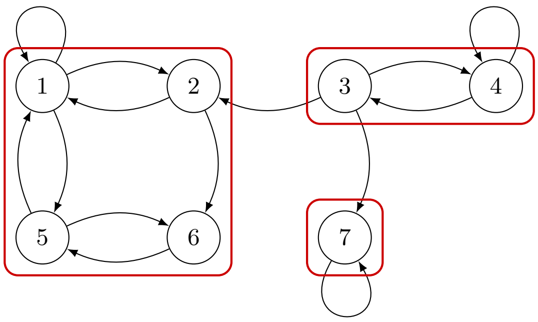
Autrement dit :

$$\forall i, j \in E, \quad \exists n, m \in \mathbb{N}^*, \quad P_{i,j}^{(n)} > 0 \quad \text{et} \quad P_{j,i}^{(m)} > 0.$$

Ce qui signifie que pour tous les couples d'états (i, j) de E, avec $i \neq j$, il existe un chemin (de probabilité strictement positive) permettant d'aller de i à j, et réciproquement. On a donc $i \leftrightarrow j$.

Exemple

Prenons par exemple la chaîne de Markov suivante, dont la représentation sous forme de graphe orienté est donnée ci-dessous :



Dans cette chaîne de Markov, nous avons trois classes de communication :

- La classe 1, formée par les états $\{1, 2, 5, 6\}$.
  - Cette classe est récurrente car chaque état la composant est récurrent. En effet, comme $\forall n \in \mathbb{N}, P_{1,1} > 0$ et que la récurrence est une propriété de classe, on a :
  $$\forall i \in \{1, 2, 5, 6\}, \exists n \in \mathbb{N}^*, \text{ tel que } P_{i,i}^{(n)} > 0.$$
  - Autrement dit, pour chaque état $i \in \{1, 2, 5, 6\}$, il est certain de revenir à cet état après un nombre fini de transitions.
- La classe 2, formée par les états $\{3, 4\}$.
  - Cette classe est transciente car les chemins $3 \to 2$ ou $3 \to 7$ existent avec une probabilité strictement positive. Ce qui signifie qu'il existe un moment où on quittera l'état 3 sans plus jamais y revenir. Autrement dit :
  $$\exists n \in \mathbb{N}^*, \text{ tel que } X_n \in \{2, 7\} \text{ et } \forall m \in \mathbb{N}, \mathbb{P}(X_{n+m} \in \{3, 4\}) = 0.$$
  - La transcience étant une propriété de classe, chaque état de la classe est alors transient. Ainsi, il existe un moment n à partir duquel nous ne reviendrons plus dans 3 ou 4, même après un nombre infini de transitions.
- Et la classe 3, formée par l'état $\{7\}$.
  - Cette classe est uniquement composée de l'état 7. L'état 7 est récurrent car en partant de cet état, on ne peut que y retourner. En effet, on a :
  $$P_{7,7} = 1 \quad \text{et} \quad \forall j \neq 7, \quad P_{7,j} = 0.$$
  - L'état 7 étant le seul état de cette classe, la classe est alors récurrente.

2.4 Probabilité invariantes et théorème ergodique

2.4.1 Probabilité invariante

La loi stationnaire peut permettre sous certaines conditions à décrire le comportement à long terme de la chaîne de Markov.

Probabilité invariantes/stationnaire

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

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

C'est-à-dire

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

Cela signifie que π est un vecteur propre à droite de la transposée $P^\top$, associé à la valeur propre 1 :

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

De plus dans notre cas, comme π est une probabilité, elle respecte les conditions suivantes :

$$\forall i \in E, \quad \pi(i) \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_{i\in E} \pi(i) = 1.$$

Existence d'une probabilité invariante

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

Démonstration

Par définition, π est invariante si $\pi P = \pi$, ou encore si $P^\top \pi^\top = \pi^\top$. Ce qui signifie que $\pi^\top$ est un vecteur propre de $P^\top$ associé à la valeur propre 1.

Or P et sa transposée $P^\top$ ont même valeurs propres (car elles ont le même polynôme caractéristique), et comme P est une matrice stochastique, on a $P\mathbb{1} = \mathbb{1}$, où $\mathbb{1}$ désigne le vecteur de $\mathbb{R}^{|E|}$ dont tous les coefficients sont égaux à 1.

Donc 1 est vecteur propre de P, et donc de $P^\top$, donc il existe un vecteur ligne μ non nul tel que $\mu P = \mu$.
Soit π le vecteur ligne tel que $\forall x \in E$, $\pi(x) = |\mu(x)|$, et montrons que π est encore vecteur propre à gauche de P.
Comme les coefficients de π sont positifs, il suffira alors de diviser π par la somme de ses coefficients pour obtenir une probabilité invariante.

On a :

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

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

Donc, $\forall x \in E$, $\pi(x) \leq \pi P_x$.

De plus :

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

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

Donc, $\forall x \in E$, $\pi(x) \leq \pi P_x$, et tous les vecteurs ont même somme car ils sont égaux.

On a donc :

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

Et comme pour tout $x \in E$, $\pi P_x - \pi(x) \geq 0$ on a $\pi P_x = \pi(x)$.
Ainsi, π renormalisé par la somme de ses coefficients est bien une probabilité invariante.

Invariance aux puissances de la matrice

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène sur un espace d'états E, de matrice de transition P, et soit π une probabilité invariante (on a alors $\pi P = \pi$).

Alors, $\forall n \in \mathbb{N}^*$, on a également :

$$\pi P^n = \pi.$$

Autrement dit, la loi invariante reste inchangée peu importe le nombre de transitions.

Démonstration

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène sur un espace d'états E, de matrice de transition P, et soit π une probabilité invariante. On a alors $\pi P = \pi$.

Par souci de clarté dans les manipulations matricielles qui suivent, et uniquement pour cette preuve, nous noterons :

$$\pi_i := \pi(i)$$

Autrement dit, π_i désigne la i-ème composante du vecteur de probabilité π.

Prouvons par **récurrence** sur $n \in \mathbb{N}^*$ que $\pi P^n = \pi$.

Cas initial :
Pour $n = 1$, on a

$$\pi P^1 = \pi P = \pi,$$

car π est invariante par définition.

Hypothèse de récurrence :
On suppose que la propriété est vraie pour $n-1$, c'est-à-dire que :

$$\pi P^{n-1} = \pi.$$

Pas de récurrence :

Montrons que la propriété est vraie pour le rang n, c'est-à-dire que :

$$\pi P^n = \pi.$$

Pour tout $i \in E$,

$$(\pi P^n)_i = \sum_{j \in E} \pi_j (P^n)_{j,i}.$$

Or, par la décomposition des puissances de P^n :

$$(P^n)_{j,i} = \sum_{k \in E} (P^{n-1})_{j,k} P_{k,i}.$$

D'où :

$$(\pi P^n)_i = \sum_{j \in E} \pi_j \sum_{k \in E} (P^{n-1})_{j,k} P_{k,i} = \sum_{k \in E} \left[\sum_{j \in E} \pi_j (P^{n-1})_{j,k} \right] P_{k,i}.$$

Et par hypothèse de récurrence :

$$\sum_{j \in E} \pi_j (P^{n-1})_{j,k} = (\pi P^{n-1})_k = \pi_k.$$

Ainsi, on a :

$$(\pi P^n)_i = \sum_{k \in E} \pi_k P_{k,i} = \pi_i,$$

Ce qui donne bien que $\pi P^n = \pi$.

Conclusion :
On a donc montré, par récurrence sur n, que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $\pi P^n = \pi$.

Probabilité invariante d'une chaîne de Markov irréductible

Toute chaine de Markov homogène irréductible admet une mesure invariante strictement positive sur E et toutes les probabilité invariantes sont proportionnelles entre elles.

2.4.2 Théorème ergodique

Théorème ergodique (admis)

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov irréductible sur un espace d'états E fini. Soit π l'unique probabilité invariante de la chaîne.

Alors, pour toute fonction $f : E \to \mathbb{R}$, on a :

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(X_k) = \sum_{x\in E} f(x)\pi(x),$$

avec probabilité 1.
En particulier, en prenant $f = \mathbb{1}_{\{x\}}$, on a :

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{1}_{\{X_k=x\}} = \pi(x),$$

avec probabilité 1.

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

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

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

Le théorème ergodique nous dit donc que la moyenne de f le long de la trajectoire de la chaîne se rapproche empiriquement, lorsque ce temps n est grand, de sa moyenne spatiale par rapport à la loi invariante. En particulier, ceci donne une nouvelle interprétation de la mesure invariante comme la fréquence du temps d'occupation d'un état en temps long.

Le théorème ergodique peut également être perçu comme une sorte de loi des grands nombres pour les chaînes de Markov.

2.5 Comportement en temps long

Maintenant que nous avons défini la loi stationnaire, nous pouvons énoncer le théorème de convergence d'une chaine de Markov homogène.

Théorème de convergence

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène, irréductible et apériodique à espace d'états fini. Soit P sa matrice de transition.
Alors, il existe une unique mesure invariante π, et pour tout état initial $i \in E$ et tout $j \in E$,

$$\lim_{n\to\infty} P^n_{i,j} = \pi(j).$$

Ce qui implique :

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} \pi(i)P^k = \pi(j).$$

Donc la loi de X_n converge vers π indépendamment de l'état initial, on a une convergence en loi.

Démonstration

Commençons par montrer l'unicité de la probabilité invariante.

La transposée d'une probabilité invariante est un vecteur propre de $P^\top$ associé à la valeur propre 1. Comme les valeurs propres de P et de $P^\top$ sont les mêmes et ont même multiplicité (car elles ont le même polynôme caractéristique), il suffit donc de montrer que l'espace propre associé à P pour la valeur propre 1 est de dimension 1.

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

Soit x_i le point où f atteint son maximum, autrement dit $f(x_i) = \max\{f(x) \mid x \in E\}$. Soit y un autre état.
Comme P est irréductible, y communique avec x_i, donc $\exists n \in \mathbb{N}^*$ tel que $P^n(x_i, y) > 0$. De plus, comme $Pf = f$, on a également que $P^n f = f$.

On a alors d'une part :

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

Et d'autre part,

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

Donc on a :

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

Qui est une somme de termes positifs.

Ainsi, comme $P^n(x_i, y) > 0$, on a $f(y) = f(x_i)$, f est donc constante et la chaîne admet une unique probabilité invariante, notée π.

Valeur de convergence

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène irréductible.

Alors, pour toute mesure initiale λ et $\forall j \in E$:

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} 1_{\{X_k=j\}} \to \pi(j).$$

Où π est l'unique probabilité invariante.

Convergence des méthodes de Monte-Carlo

Soit X une chaine de Markov homogène irréductible, alors pour toute mesure initiale λ et pour toute fonction mesurable bornée f, on a :

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

Il s'agit de la méthode utilisée dans les algorithmes de Monte-Carlo.

Ces théorèmes nous permettront de conclure quant à la preuve de Hastings-Metropolis.

3 Fonctionnement de l'algorithme de Hastings-Metropolis

3.1 Qu'est-ce qu'une méthode dite MCMC ?

Les méthodes MC dites de Monte-Carlo ont pour but d'approcher de manière empirique des valeurs par un processus aléatoire répété un nombre suffisant de fois. Elles interviennent quand une résolution déterministe est trop difficile à obtenir, comme pour calculer des intégrales ou générer des échantillons de distributions statistiques. Les méthodes MC sont très fiables malgré l'aléatoire utilisé, pourvu que l'algorithme ait les bonnes optimisations telles que le nombre de répétitions, la précision exigée, la vitesse de convergence vers les valeurs cherchée, etc.
Les méthodes MC sont utilisées dans beaucoup de domaines des sciences (comme la physique, la chimie, la biologie, les mathématiques statistiques, l'intelligence artificielle, la finance et la cryptographie).

Les méthodes MCMC (Monte-Carlo par chaînes de Markov) sont une sous-famille des algorithmes MC qui construisent, dans leur fonctionnement, une chaîne de Markov dont la distribution stationnaire est celle que l'on souhaite estimer.
Il devient ainsi possible d'exploiter les propriétés des chaînes de Markov, notamment leur convergence vers une distribution stationnaire et leur propriété d'ergodicité, qui peuvent être plus utiles que la loi des grands nombres seule, utilisée dans les méthodes MC classiques.
La principale différence entre les méthodes MC et MCMC réside dans la dépendance entre les points générés. Les méthodes MC choisissent aléatoirement des points de l'espace, réalisant ainsi un échantillonnage direct de la distribution cible, avec des échantillons indépendants les uns des autres. Leur seul point commun est d'appartenir à l'intervalle des valeurs possibles de la distribution de départ. En revanche, les méthodes MCMC reposent sur une marche aléatoire : elles génèrent chaque nouveau point à partir du précédent selon une règle de transition déterminée. Cela crée une chaîne de points corrélés, qui possède les propriétés des chaînes de Markov.
Ainsi, lorsque la distribution est concentrée sur une certaine partie de l'espace, l'utilisation de MCMC sera généralement préférable, car elle permet d'obtenir, dans un temps raisonnable, des échantillons représentatifs de cette distribution.

On pourra citer les méthodes MCMC d'échantillonnage de Gibbs (et ses variantes comme le Blocked Gibbs Sampling ou l'Adaptive Gibbs Sampling), qui prennent leur intérêt lorsque les variables de la distribution sont conditionnelles. Il existe aussi l'échantillonnage par tranches, qui échantillonne progressivement la distribution par "tranches" de valeurs, ou bien des optimisations de HM, telles que la méthode hamiltonienne de Monte-Carlo, qui calcule le gradient pour faciliter la marche du programme et rejeter moins de valeurs, tout en gagnant en performances.

3.2 Définitions

Notation

Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une chaîne de Markov homogène à valeurs dans un ensemble fini ou dénombrable E. Soit Q la matrice de transition associée à cette chaîne de Markov.

$\forall i, j \in E$, on pose :

$$Q(i,j) = Q_{i,j}.$$

Algorithme d'échantillonnage

Un algorithme d'échantillonnage est un algorithme nous permettant d'obtenir un échantillonnage, à partir d'une certaine probabilité sur la population. La plus part du temps, le but de ce genre d'algorithmes est de donnée un échantillonnage à partir d'une loi dure à échantillonner.

Algorithme d'Hastings-Metropolis

L'algorithme d'Hastings-Metropolis est une méthode d'échantillonnage MCMC qui produit une chaîne de Markov ayant pour distribution stationnaire une loi cible π. Il repose sur une règle d'acceptation/rejet de propositions successives, selon une probabilité α calculée à chaque étape.

3.3 Pseudo-code de l'algorithme d'Hastings-Metropolis

Procédure Hastings-Metropolis

1. On commence par choisir un point x_0, comme étant le premier échantillon de notre loi cible, ainsi qu'une probabilité de transition g, en donnant les fonctions correspondant à $g_y(x)$ et $g(x)$, $\forall x, y \in E$.
2. Ensuite nous itérons sur t allant de 0 à $N-1$ inclus (le nombre d'itérations voulu)
   - On tire x avec $g_{x_t}(x)$
   - On pose $\alpha := \frac{\pi(x)g_x(x_t)}{\pi(x_t)g_{x_t}(x)}$ (notons que si nous ne possédons qu'une densité proportionnelle à π, f nous pouvons poser $\alpha := \frac{f(x)g_x(x_t)}{f(x_t)g_{x_t}(x)}$)
   - On tire $u \in [0; 1]$, tel que $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$
     - Si $u \leqslant \alpha$ alors : $x_{t+1} := x$
     - Sinon : on conserve l'état précédent $x_{t+1} := x_t$
3. La séquence $\{x_0, x_1, \dots, x_{N-1}\}$ constitue donc l'échantillon obtenu à partir de la chaîne de Markov associée à la loi π

3.4 Preuve de l'algorithme

Probabilité d'acceptation/rejet

On définit la probabilité d'acceptation/rejet comme le facteur :

$$\min\big(1, \frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)}\big),$$

pour $x, y \in E$, et pour π et Q une probabilité et une matrice de transition sur E respectivement.

Objectif de la preuve : On souhaite vérifier que la chaîne obtenue à partir de l'algorithme admet comme matrice de transition P, définie comme la matrice Q multipliée par la probabilité d'acceptation/rejet.

Démonstration

Un saut partant de x est simulé en choisissant un candidat y par la loi $Q(x,\cdot)$, puis on saute sur y avec probabilité d'acceptation/rejet α, sinon on reste sur x.

Pour chaque étape i, on note Y_i la variable aléatoire tirée selon la loi $Q(x_{i-1},\cdot)$, et U_i la variable aléatoire utilisée pour effectuer le choix de sauter ou non. U_i est indépendante de Y_i et X_{i-1}.

Soient $x, y \in E$, $x \neq y$, on a donc :

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = y \mid X_n = x)$$

$$= \mathbb{P}(Y_{n+1} = y \text{ et } U_{n+1} \leq \frac{\pi(Y_{n+1})Q(Y_{n+1}, X_n)}{\pi(X_n)Q(X_n, Y_{n+1})} \mid X_n = x)$$

On remplace Y_{n+1} par y, et X_n par x :

$$= \mathbb{P}(Y_{n+1} = y \text{ et } U_{n+1} \leq \frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)} \mid X_n = x)$$

Puis, par l'indépendance de U_i avec X_i et Y_i :

$$= \min(1, \frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)})Q(x,y)$$

On suppose à partir de maintenant que $\forall x \in E$, $\pi(x) \neq 0$ et que $\forall x, y \in E$, $Q(x,y) > 0 \iff Q(y,x) > 0$.

Montrons que la mesure π est bien la mesure invariante associée à la chaine de Markov de matrice P.

Démonstration (suite)

Montrons que la mesure π est réversible pour P.
Pour tout couple $x, y \in E$, et μ une probabilité quelconque :

$$\mu(x)P(x,y) = \mu(y)P(y,x)$$

Vérifions qu'une mesure réversible est invariante :

$$\mu P(y) = \sum_{x \in E} \mu(x)P(x,y) = \sum_{x \in E} \mu(y)P(y,x) = \mu(y) \sum_{x \in E} P(y,x) = \mu(y)$$

Vérifions maintenant cette propriété.

- Si $x = y$: la propriété est vraie (par réflexivité).
- Si $x \neq y$, on distingue deux sous-cas :
  - Si $Q(x,y) = Q(y,x) = 0$, alors on a trivialement :

$$\pi(x)P(x,y) = \pi(y)P(y,x) = 0.$$

  - Si $Q(x,y)$ et $Q(y,x)$ sont non nuls, alors :

$$\begin{aligned}
\pi(x)P(x,y) &= \pi(x)Q(x,y) \min\left(1, \frac{\pi(y)Q(y,x)}{\pi(x)Q(x,y)}\right) \\
&= \min\left(\pi(x)Q(x,y), \pi(y)Q(y,x)\right) \\
&= \pi(y)Q(y,x) \min\left(1, \frac{\pi(x)Q(x,y)}{\pi(y)Q(y,x)}\right) \\
&= \pi(y)P(y,x).
\end{aligned}$$

Finalement, montrons que si de plus Q est irréductible, alors P est également irréductible, et qu'on a ainsi les convergences usuelles vers π quand $n \to \infty$.

Démonstration (conclusion)

Vu que nous avions supposé que $\pi(x) \neq 0$: on a $P(x,y) > 0$ dès que $Q(x,y) > 0$.

Ainsi, toute trajectoire réalisable à partir de Q est également réalisable à partir de P, et l'irréductibilité de Q entraîne l'irréductibilité de P.

On a ainsi démontré la correction de l'algorithme d'Hastings-Metropolis.

3.5 Application au cas du voyageur de commerce

Application au TSP

Dans le cas du problème du voyageur de commerce (dit "TSP"), l'algorithme nécessite une application adaptée. Notre espace d'état E correspond aux permutations des points. Par exemple, dans le cas de 3 points x_1, x_2, x_3, $E = \{(x_1,x_2,x_3),(x_2,x_1,x_3),(x_2,x_3,x_1),(x_1,x_3,x_2),(x_3,x_2,x_1),(x_3,x_1,x_2)\}$, ce qui, avec notre implémentation actuelle, nécessiterait de manipuler une matrice 6×6. Lorsque le nombre de villes augmente, nous aurions besoin d'une matrice carrée de taille $n!$, où n est le nombre de points, ce qui devient rapidement irréaliste.

Nous définissons donc des fonctions adaptées sur l'espace d'état E :

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

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

— Une distribution cible, avec $\beta \in]0, +\infty[$ un paramètre ajustable, plus β est grand, plus la distribution sera concentrée sur les plus petite distances totales, dans notre cas, plus il sera grand, plus l'algorithme aura une convergence proche de notre distance minimal, mais en contrepartie, le nombre d'itérations nécessaires pour avoir une convergence résonnable sera grand.

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

— Une variable aléatoire $S : E \to E$, suivant une loi de chaîne de Markov. Nous pouvons modéliser cette transition par une fonction `permutation(` $[x_1, \ldots, x_n]$), qui renvoie la même liste avec seulement deux villes permutées.

Nous pouvons donc redéfinir l'algorithme avec le pseudo code suivant :

Procédure Hastings-Metropolis TSP

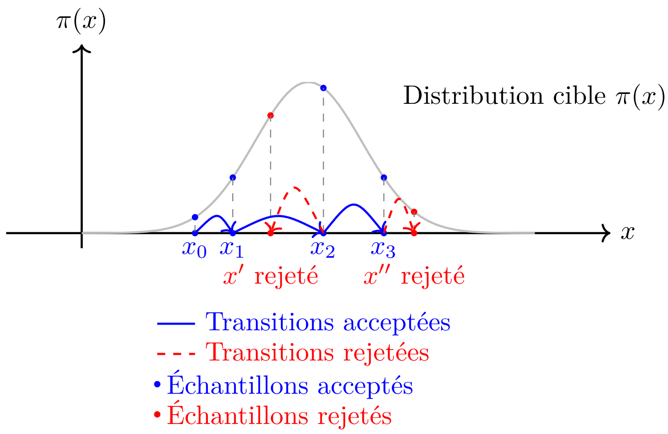
1. On prend p_0, une permutation donnée
2. Ensuite nous itérons sur t allant de 0 à N (notre nombre d'itérations voulu)
   — On tire p avec la variable aléatoireS_{p_t}, on peut utilisé la fonction "permutation" défini plus tôt.
   — Calculer $\alpha := \frac{\pi(p)}{\pi(p_t)}$ si la transition est symétrique, c'est-à-dire $\mathbb{P}(S_{p_t} = p) = \mathbb{P}(S_p = p_t)$.
   — Sinon $\alpha := \frac{\pi(p)\mathbb{P}(S_p = p_t)}{\pi(p_t)\mathbb{P}(S_{p_t} = p)})$
   — On tire $u \in [0; 1]$, tel que $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$
      — Si $u \leqslant \alpha$ alors : $p_{t+1} := p$
      — Sinon : on conserve l'état précédent $p_{t+1} := p_t$
3. La séquence $\{p_0, p_1, \ldots, p_{N-1}\}$ constitue donc l'échantillon obtenue à partir de la chaîne de Markov associé à la loi π

On peut retirer de la séquence $\{p_0, p_1, \ldots, p_{N-1}\}$ le meilleur résultat en prenant la $p_m \in E : D(p_m) = \min(D(E))$.

3.6 Exemples d'applications d'Hastings-Metropolis

Exemple 1

Afin de comprendre le déroulement de l'algorithme, on peut s'appuyer sur un graphique illustrant le début d'une simulation d'Hastings-Metropolis dans un espace d'états continu. Bien que cet exemple diffère du reste du rapport qui traite d'états discrets, les propriétés énumérées de l'algorithme restent les mêmes.
Ce cas a été choisi pour sa clarté visuelle : il permet de suivre facilement les étapes de l'algorithme, voici le schéma :

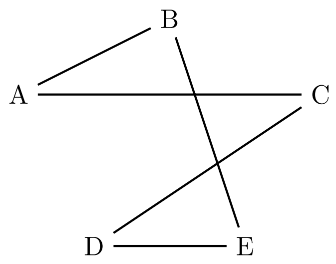


Dans cet exemple, la distribution cible $\pi(x)$ est représentée par la courbe grise, ici une distribution normale. L'axe des ordonnées indique les valeurs prises par cette densité, tandis que l'axe des abscisses correspond aux différents états que la chaîne de Markov peut atteindre au fil des itérations.
Nous choisissons arbitrairement l'état x_0 comme départ et cherchons à créer un échantillon de taille 4. Cet état fait donc partie de l'échantillon.
L'algorithme propose un nouvel état x_1, tiré avec la loi de transition $g(x_1 \mid x_0)$ à partir de l'état courant. On tire alors le taux d'acceptation $\alpha = \min\left(1, \frac{\pi(x')g(x|x')}{\pi(x)g(x'|x)}\right)$ connu à un coefficient près, et un tirage de la loi uniforme $u \sim \mathcal{U}(0,1)$. Si $u \leqslant \alpha$ on accepte ce nouvel état, sinon on le rejette.
Sur le schéma, x_1 est proposé puis accepté, suivi de x_2 également accepté. Un autre candidat x' est ensuite rejeté, ce qui conduit à conserver x_2 pour l'itération suivante, et ainsi de suite.
À noter que certains états peuvent être sélectionnés même s'ils semblent se situer dans des zones de faible densité (c'est le cas ici de x_3).

Exemple 2

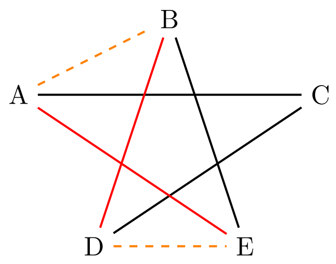
Considérons maintenant un cas simple du TSP avec 5 villes A, B, C, D et E, donc dans un système d'états finis par lequel on essaie d'obtenir le chemin de longueur minimale. La différence notable avec le précédent exemple est que l'on ne cherche plus à échantillonner des points sur une courbe de densité mais des chemins entre les villes. Chaque possibilité est donc un ordre de visite des villes, et il en existe $5! = 120$ au total. À l'issue de l'exécution, on obtient alors un échantillon de chemins optimisés les plus courts qui ont été sélectionné plus fréquemment. On peut ainsi approcher de manière probabiliste une solution optimale au problème du voyageur de commerce.
Le schéma suivant représente la situation initiale x :

Diagramme initial à optimiser



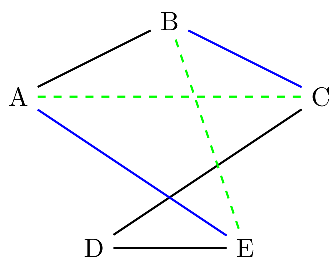
Voici un exemple de chemin refusé par HM, en noir et rouge, les pointillés représentant les différences avec l'état d'origine :

Exemple de proposition rejetée par HM



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

Exemple de proposition retenue par HM



3.7 Brèves descriptions d'autres méthodes MCMC permettant de résoudre le TSP

Il existe plusieurs autres méthodes de MCMC qui peuvent en fonction du contexte, s'avérer plus pertinentes que l'algorithme de Hastings-Metropolis. En voici une liste non exhaustive, accompagnée d'une brève présentation.

L'échantillonnage de Gibbs

Comme l'algorithme de Hastings-Metropolis, cette méthode repose sur la construction d'une chaîne de Markov ayant pour distribution stationnaire une distribution cible π. L'échantillonnage de Gibbs consiste à mettre à jour séquentiellement chaque composante d'un vecteur aléatoire, conditionnellement aux autres composantes. Cette méthode est particulièrement efficace lorsque les distributions conditionnelles $\pi(x_i \mid \cdot)$ sont facilement échantillonnables.

Le Monte Carlo Hamiltonien (HMC)

Inspirée de la mécanique Hamiltonienne et dérivée de l'algorithme de Hastings-Metropolis, cette méthode exploite les gradients de la distribution cible pour guider la dynamique d'échantillonnage. Elle permet de générer des échantillons efficaces dans des espaces de grande dimension, en particulier lorsqu'on souhaite estimer des intégrales par rapport à une distribution cible, par exemple pour le calcul d'espérances.

D'autres méthodes existent (comme les algorithmes de recuit simulé ou les approches par échantillonnage adaptatif), mais elles sont généralement plus complexes à mettre en œuvre ou spécifiques à certains types de problèmes.

4 Conclusion

En conclusion, ce rapport a permis d'explorer l'algorithme de Hastings-Metropolis ainsi que la théorie des chaînes de Markov sur laquelle il s'appuie pour générer des échantillons fiables, ouvrant la voie à la résolution efficace de divers problèmes complexes, comme celui du voyageur de commerce.

La force des approches probabilistes, fondées sur un parcours astucieux des distributions imposées, réside dans leur capacité à résoudre des problèmes là où les algorithmes déterministes échouent. Plus qu'une simple solution, Hastings-Metropolis marque un tournant fondamental en 1970 : sa stratégie probabiliste, capable de simplifier des situations complexes en ensembles plus abordables et pertinents, a révolutionné l'approche de nombreux problèmes dans des domaines variés.

Encore largement utilisé aujourd'hui, son modèle a donné lieu à de nombreuses variantes optimisant ses fonctionnalités en fonction des besoins spécifiques, tout en restant une référence incontournable.

5 Annexe

5.1 Implémentation en Python

L'annexe de ce rapport contient les implémentations en Python 3 de l'algorithme de Hastings-Metropolis, ainsi que différents exemples d'applications de cet algorithme.

5.2 Accès interactif au code source et aux implémentations

Le code source complet du projet est disponible sur GitHub à l'adresse suivante : `https://github.com/CorentinVaillant/ProjetMath-HastingMetropolis`

Pour une exploration interactive des implémentations, un Jupyter notebook est accessible via Google Collaboration : `https://colab.research.google.com/drive/1gUXCEhjoGEOfXZ4Y-LxVnypVxw9O451R?usp=sharing`

Ce Jupyter notebook regroupe l'ensemble des implémentations présentées dans la suite de ce rapport ainsi que d'autres représentations n'ayant pas pues être présentées ici du à une contrainte de place.

Il peut être exécuté directement depuis votre navigateur sans installation préalable, vous permettant ainsi de pouvoir tester et manipuler tous les algorithmes implémentés de manière interactive.

5.3 Implémentation de l'algorithme d'Hastings-Metropolis

Cette sous-section contient l'implémentation de l'algorithme de Hastings-Metropolis, comme décrite dans la sous-section 3.2. Le code source est divisé en plusieurs fonctions / groupe de fonctions, chacune ayant un rôle spécifique dans l'implémentation de l'algorithme.

5.3.1 Fonctions utilitaires

Le groupe de fonctions ci-dessous est constitué de toutes les fonctions utilitaires nécessaires à l'implémentation de l'algorithme de Hastings-Metropolis. Elles sont toutes directement intégrées dans le notebook.

```
import numpy as np
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.colors as mcolors
from math import factorial, comb

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

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

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


def plot_graph_mat(trans_mat: np.ndarray) -> None:
    G = nx.DiGraph()

    # ajout des arcs avec poids
    num_states = trans_mat.shape[0]
    edges, weights = [], []
    for i in range(num_states):
        for j in range(num_states):
            if trans_mat[i, j] > 0:
                G.add_edge(i, j, weight=trans_mat[i, j])
                edges.append((i, j))
                weights.append(trans_mat[i, j])

    # normalization des poids pour la coloration
    norm = mcolors.Normalize(vmin=min(weights), vmax=max(weights))
    cmap = plt.cm.Blues
    edge_colors = [cmap(norm(w)) for w in weights]

    pos = nx.spring_layout(G)

    # affichage des noeuds
    plt.figure(figsize=(6, 6))
    nx.draw(G, pos, with_labels=True, node_color='lightblue', node_size=700,
                                        arrowsize=20)

    # affichages des arcs
    nx.draw_networkx_edges(G, pos, edgelist=edges, edge_color=edge_colors,
                                       edge_cmap=cmap, width=2, arrows=
                                       True)

    # ajout de l'echelle des couleurs
    sm = plt.cm.ScalarMappable(cmap=cmap, norm=norm)
    sm.set_array([])
    plt.colorbar(sm, label="probabilite de transition")

    plt.show()
```

5.3.2 Fonctions de l'algorithme Hastings-Metropolis

Les fonctions ci-dessous constituent le coeur de l'implémentation de l'algorithme de Hastings-Metropolis. Elles permettent de simuler des tirages aléatoires selon une distribution cible à l'aide d'une chaîne de Markov construite progressivement.

La fonction `next_state_markov(x, transitions)` renvoie un état y (un entier), avec une probabilité donnée par $g_x(y)$:

```
#Tire aleatoirement le prochaine etat d'une chaine de Markov representee par une
                                        matrice
def next_state_markov(x:int,transitions:np.array)->int:
        return np.random.choice(len(transitions),p=transitions[x])
```

La fonction `markov_chain_from_tirage(tirage, nb_etats)` transforme un tirage en une matrice de transition, représentant une chaîne de Markov :

```
#Tire aleatoirement le prochain etat d'une chaine de Markov representee par une
                                        matrice
def next_state_markov(x:int,transitions:np.array)->int:
        return np.random.choice(len(transitions),p=transitions[x])
```

La fonction `hastings_metropolis_tirage(x0, distribution_cible, proposition, iterations)` renvoie un tirage en suivant l'algorithme de Hastings-Metropolis :

```
#Implementation de HM
def hastings_metropolis_tirage(x0:int,distribution_cible,proposition : np.array,
                                        iterations:int = 1000)->np.array:
    x_t = x0
    tirage = [x_t]

    for _ in range(iterations):
        # tirage de x
        x = next_state_markov(x_t,proposition)

        # a:= (PI(x)*g(x_t|x)) / (PI(x_t)*g(x|x_t))
        pi_xt = distribution_cible(x_t)
        pi_x = distribution_cible(x)
        g_xt_x = proposition[x_t][x]
        g_x_xt = proposition[x][x_t]
        if pi_xt * g_xt_x == 0 : alpha = 1 # on evite la division par 0
        else : alpha = min(1,(pi_x * g_x_xt)/(pi_xt * g_xt_x))

        #on tire u de maniere uniforme dans [0;1]
        u = np.random.uniform(0,1)

        # Si u <= a alors : x_(t+1) = x'
        # Sinon : x_(t+1) = x_t
        if u <= alpha : x_t = x
        tirage.append(x_t)

    return np.array(tirage)
```

Enfin, la fonction `hastings_metropolis` combine le tout afin de générer directement une chaîne de Markov à partir de l'algorithme :

```
#Utilise hastings_metropolis_tirage pour creer une chaine de Markov (matrice de
                                        transition) ayant la distribution du
                                        tirage obtenue
def hastings_metropolis(x0:int,distribution_cible,proposition : np.array,
                                        iterations:int = 1000)->np.array:
    tirage = hastings_metropolis_tirage(x0,distribution_cible,proposition,
                                            iterations = iterations)
    return markov_chain_from_tirage(tirage,proposition.shape[0])
```

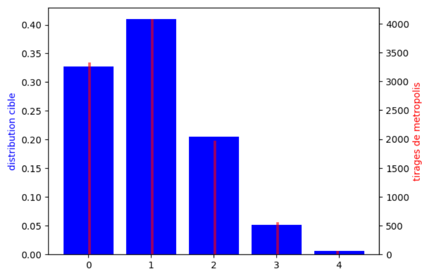
5.4 Exemples d'application de l'algorithme d'Hastings-Metropolis

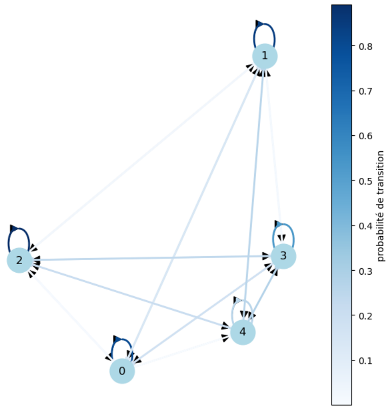
Cette section présente plusieurs exemples d'application de l'algorithme de Hastings-Metropolis. Les visualisations ont été réalisées à l'aide de la bibliothèque `matplotlib`, et reposent sur les implémentations décrites précédemment.

5.4.1 Application à une loi binomiale

```
# Application a petite loi binomial
N = 5

distribution_cible = binomial(N,0.2)

#matrice de transition quelconque
proposition = np.array([ ligne / ligne.sum()
    for ligne in [np.random.rand(N) for _ in range(N)]
])

tirage = hastings_metropolis_tirage(0,distribution_cible,proposition,iterations=
                                    10_000)
mk_c = markov_chain_from_tirage(tirage,N)
```

Résultat et graphe de la matrice de transition :

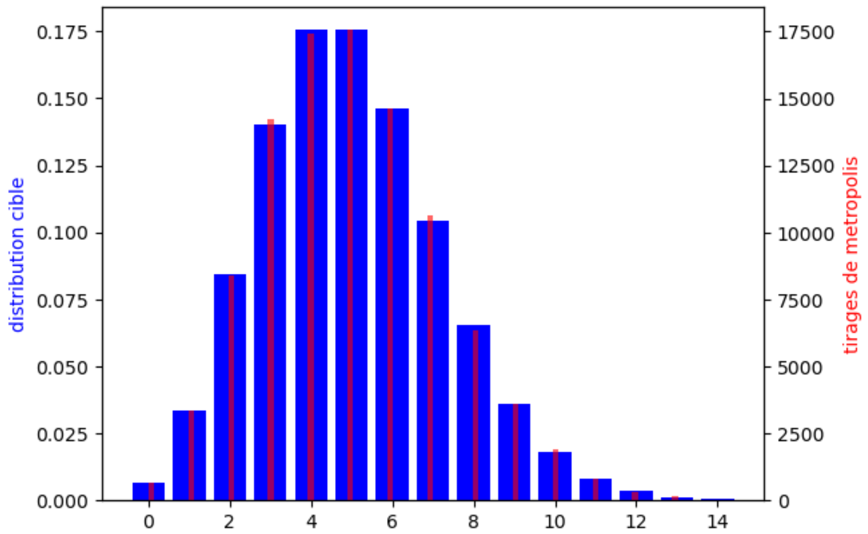




5.4.2 Application à une loi de Poisson

```
# Application loi de poisson
N = 15

distribution_cible = poisson(5)

#matrice de transition uniforme de taille NxN
proposition = np.full((N,N),1/N)

tirage = hastings_metropolis_tirage(0,distribution_cible,proposition,iterations=
                                    100_000)
mk_c = markov_chain_from_tirage(tirage,N)
```

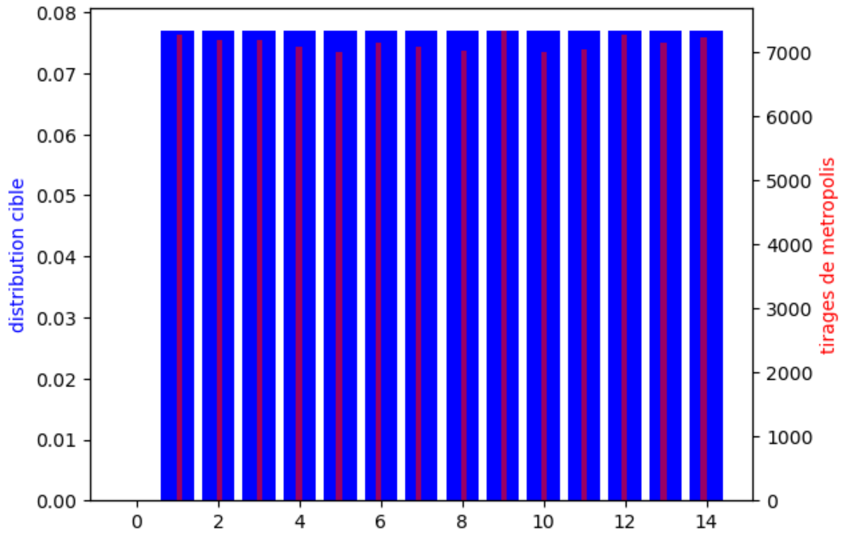
Résultats :



5.4.3 Application à une loi uniforme

```
# Application loi uniforme

N = 15

distribution_cible = lambda k : 1/(N-2) if 0<k and k<N else 0

#matrice de transition aleatoire
proposition = np.array([ ligne / ligne.sum()
    for ligne in [np.random.rand(N) for _ in range(N)]
])


tirage = hastings_metropolis_tirage(0,distribution_cible,proposition,iterations=
                                        100_000)
mk_c = markov_chain_from_tirage(tirage,N)
```

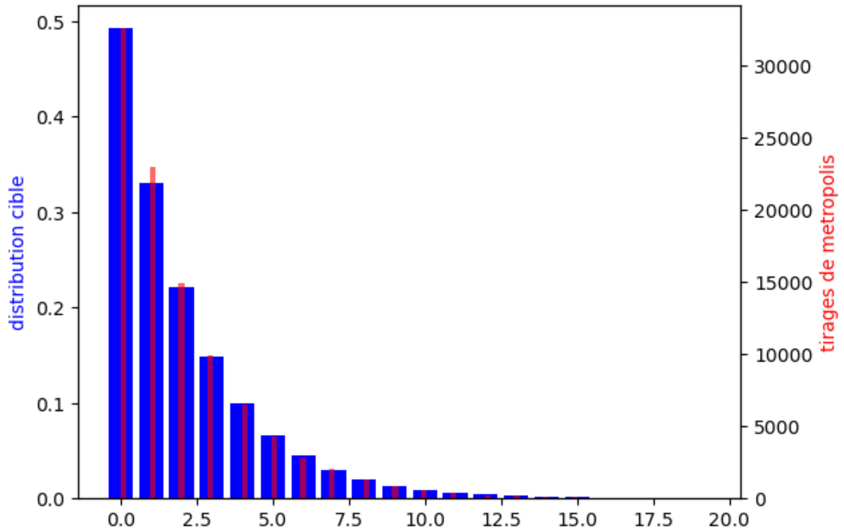
Résultats :



5.4.4 Application à une loi géométrique

```
# Demonstration loi geometrique

N = 20

distribution_cible = geo(0.33)

#matrice de transition aleatoire
proposition = np.array([ ligne / ligne.sum()
    for ligne in [np.array([abs(np.random.normal(i,1)) for _ in range(N)]) for i
                                                         in range(N)]
])

tirage = hastings_metropolis_tirage(0,distribution_cible,proposition,iterations=
                                                       100_000)
mk_c = markov_chain_from_tirage(tirage,N)
```

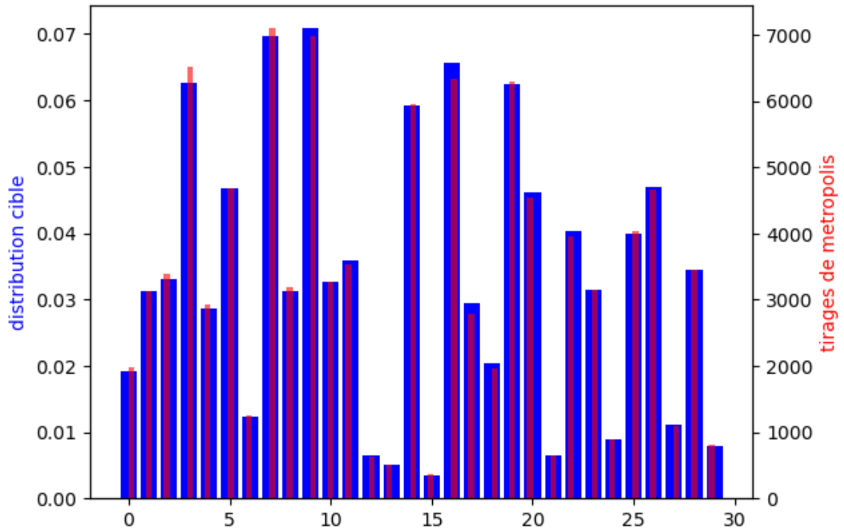
Résultats :



5.4.5 Application à une loi quelconque

```
# Demonstration loi quelconque

N = 30

distribution = np.random.rand(N)
distribution = distribution / distribution.sum()

distribution_cible = lambda k : distribution[k] if k < N and 0<=k else 0

#matrice de transition aleatoire
proposition = np.array([ ligne / ligne.sum()
    for ligne in [np.array([abs(np.random.normal(i,1)) for _ in range(N)]) for i
                                                   in range(N)]
])

tirage = hastings_metropolis_tirage(0,distribution_cible,proposition,iterations=
                                              100_000)
mk_c = markov_chain_from_tirage(tirage,N)
```

Résultats :



5.5 Implémentation de l'algorithme d'Hastings-Metropolis pour le TSP

Cette section présente l'application de l'algorithme de Hastings-Metropolis au problème du voyageur de commerce (TSP), accompagnée du code source et d'exemples illustrés. Plusieurs fonctions ont été spécifiquement développées pour adapter l'algorithme au problème du voyageur de commerce.

La fonction `echanger_points` copie une liste et échange au hasard la position de deux points dans cette liste.
La fonction `distance_total` retourne la somme des distance entre tous les points d'une liste. Les distances sont données par une matrice `distances`.
Enfin, la fonction `tsp_distribution_cible` correspond à la distribution cible pour notre algorithme :

```python
# Echange deux points
def echanger_points(p):
    p_new = p.copy()
    i, j = np.random.choice(len(p), size=2, replace=False)
    p_new[i], p_new[j] = p_new[j], p_new[i]
    return p_new

# Calcule la distance totale d'une liste de points
def distance_total(tournee, distances):
    return sum(distances[tournee[i], tournee[(i+1) % len(tournee)]] for i in
                                            range(len(tournee)))

# Distribution cible pour le TSP
def tsp_distribution_cible(tournee, distances, beta=1):
    return np.exp(-beta * distance_total(tournee, distances))
```

La fonction `hastings_metropolis_tsp` applique l'algorithme de Hastings-Metropolis à la résolution du problème du voyageur de commerce (TSP).
La fonction `meilleur_solution` renvoie quant à elle la meilleure solution rencontrée au cours de l'exécution de l'algorithme :

```python
def hastings_metropolis_tsp(p0, distances, beta=1.0, iterations = 1_000):
    p_t = p0.copy()
    tirage = [p_t.copy()]

    for _ in range(iterations):
        p_prime = echanger_points(p_t)

        pi_pt = tsp_distribution_cible(p_t, distances, beta)
        pi_p = tsp_distribution_cible(p_prime, distances, beta)

        #proposition symetrique :
        alpha = min(1, pi_p/pi_pt) if pi_pt > 0 else 1

        u = np.random.uniform()
        if u <= alpha:
            p_t = p_prime

        tirage.append(p_t.copy())

    return tirage

def meilleur_solution(tirage, distances):
    return min(tirage, key=lambda tour: distance_total(tour, distances))
```

5.6 Exemples d'application d'Hastings-Metropolis pour le TSP

Cette section présente plusieurs exemples illustrant le fonctionnement de l'algorithme de Hastings-Metropolis appliqué au TSP.

Cependant, afin de générer les données nécessaires à l'exécution des simulations, nous avons besoin des deux nouvelles fonctions utilitaires suivantes.
La fonction `generer_villes` crée aléatoirement les coordonnées de n villes dans le plan.
La fonction `matrice_distances` calcule la matrice des distances euclidiennes entre toutes les paires de villes générées :

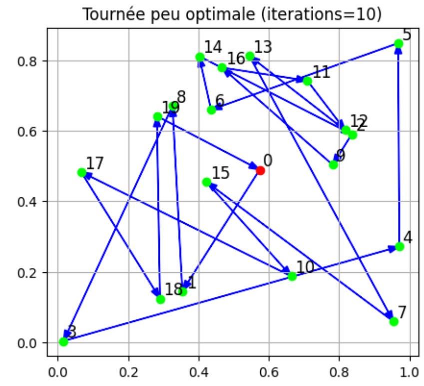
```

#generes de facon aleatoire des coordonnees
def generer_villes(n):
    return np.random.rand(n,2)

#generes la matrice de distance d'un ensemble de points(villes)
def matrice_distances(villes):
    return np.linalg.norm(villes[:, np.newaxis] - villes, axis=2)
```

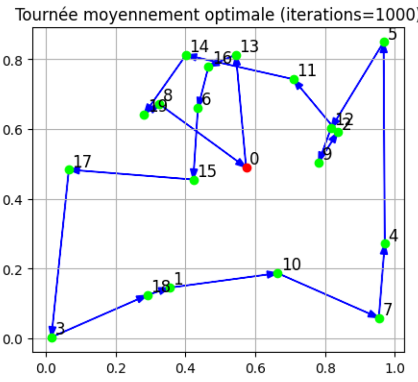
5.6.1 Différences obtenues selon le nombre d'itérations

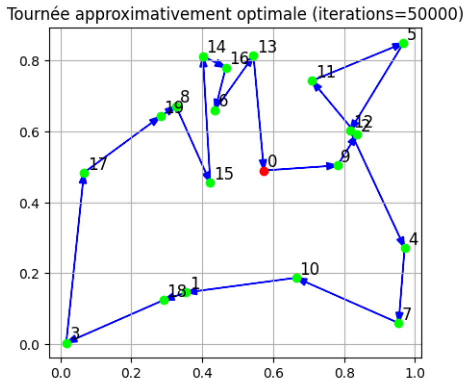
Plus le nombre d'itérations augmente, plus le résultat obtenu tend à se rapprocher de la solution optimale.
Les extraits de code suivants montrent l'application de l'algorithme pour différents nombres d'itérations, ainsi que la visualisation des meilleures tournées obtenues :

```
n_villes = 20
villes = generer_villes(n_villes)
distances = matrice_distances(villes)
p0 = list(range(n_villes))


tirage = hastings_metropolis_tsp(p0, distances, beta=5.0, iterations=10)
meilleur = meilleur_solution(tirage, distances)

tracer_tournee(villes, meilleur, titre="Tournee peu optimale (iterations=10)")

tirage = hastings_metropolis_tsp(p0, distances, beta=5.0, iterations=1000)
meilleur = meilleur_solution(tirage, distances)

tracer_tournee(villes, meilleur, titre="Tournee moyennement optimale (iterations
                                        =1000)")

tirage = hastings_metropolis_tsp(p0, distances, beta=5.0, iterations=50000)
meilleur = meilleur_solution(tirage, distances)
```

Nous avons ici appliqué l'algorithme de Hastings-Metropolis à un ensemble de 20 villes, placées aléatoirement sur le plan, et avons ensuite visualisé les résultats obtenus pour 10, 1000 et 50000 itérations respectivement.







Ces résultats illustrent clairement l'impact du nombre d'itérations sur la qualité de la solution obtenue :

— Pour seulement 10 itérations, la tournée est généralement très éloignée de l'optimale, présentant un parcours inefficace contenant de nombreux détours.

— Pour 1000 itérations, même si la tournée devient nettement plus cohérente et optimisée, plusieurs améliorations restent possibles.

— Enfin, pour 50000 itérations, la solution proposée se rapproche grandement de la solution optimale.

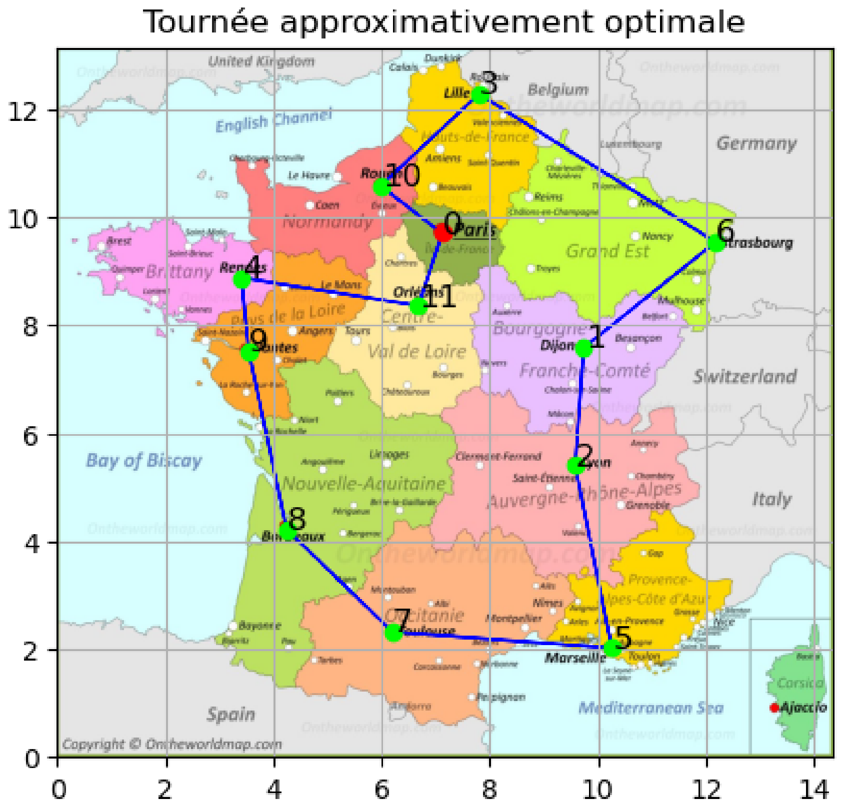
Cependant, il est essentiel de noter que le temps de calcul de l'algorithme augmente proportionnellement au nombre d'itérations. De plus, le temps nécessaire pour améliorer significativement la solution augmente de façon logarithmique avec le nombre d'itérations : l'écart de qualité entre 10 et 1000 itérations se réduit beaucoup plus rapidement que celui entre 1000 et 50000 itérations. Ainsi, augmenter les itérations améliore la qualité de la solution, mais alourdit aussi la complexité temporelle, ce qui peut devenir un facteur limitant selon les ressources disponibles ou les contraintes de temps.

5.6.2 Application à un cas concret

Voici différentes coordonnées représentant les 12 grandes villes de France. Nous avons appliqué notre algorithme pour déterminer l'ordre optimal permettant de parcourir ces villes.

```
N = 12
villes = np.array([
    [7.12,9.7],  #Paris
    [5.98,10.58],#Rouen
    [7.8,12.28], #Lille
    [10.26,2.02], #Marseille
    [12.18,9.54], #Strasbourg
    [9.74,7.58], #Dijon
    [9.58,5.4], #Lyon
    [6.2,2.32], #Toulouse
    [4.24,4.22], #Bordeaux
    [3.54,7.52], #Nantes
    [3.4,8.88],  #Rennes
    [6.68,8.36], #Orleans
])
img = mpimg.imread('../ressources/externs/carte_france.png')

xmin, xmax = 0, 1306/91
ymin, ymax = 0, 1196/91

np.random.shuffle(villes)

distances = matrice_distances(villes)
p0 = list(range(N))

tirage = hastings_metropolis_tsp(p0, distances, beta=5.0, iterations=10_000)
meilleur = meilleur_solution(tirage, distances)

print("Distance trouvee :", distance_total(meilleur, distances))

fig, ax = plt.subplots()
ax.imshow(img, extent=[xmin, xmax, ymin, ymax])

ax.set_xlim(xmin, xmax)
ax.set_ylim(ymin, ymax)

tracer_tournee(villes, meilleur, titre="Tournee approximativement optimale", ax=
                                        ax)
plt.show()
```

Nous obtenons alors le résultat suivant :



6 Bibliographie

6.1 Documents textuels :

— Physical Based Rendering, from the theory to implementation Matt Pharr, Wenzel Jakob, Gre

— https://fr.wikipedia.org/wiki/Chaîne_de_Markov

— https://dms.umontreal.ca/~bedard/BergeronL_rapport_final.pdf

— https://www.math.univ-paris13.fr/~tournier/fichiers/agreg/2014/cours_markov.pdf

— https://www.math.u-bordeaux.fr/~mchabano/Agreg/ProbaAgreg1213-COURS5-CM.pdf

— https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~pierre-loic.meliot/agreg/markov.pdf

— https://www.college-de-france.fr/fr/agenda/cours/apprentissage-et-generation-par-echantillonnage-aleatoire/algorithme-de-metropolis-hasting

— https://www.math.u-bordeaux.fr/~mibonnef/mimse-markov/recurence-transience.pdf

— https://perso.univ-rennes1.fr/jean-christophe.breton/agreg/AGREG/COURS/ch-mark2.pdf

— https://fr.wikipedia.org/wiki/Processus_stochastique

— https://fr.wikipedia.org/wiki/Méthode_de_Monte-Carlo_par_chaînes_de_Markov

— https://www.math.u-bordeaux.fr/~mchabano/Agreg/ProbaAgreg1314-COURS5-CM.pdf

— https://fr.wikipedia.org/wiki/Algorithme_de_Metropolis-Hastings#cite_note-2

— https://www.radcliffe.harvard.edu/news-and-ideas/flash-of-genius

— https://fr.wikipedia.org/wiki/Probl%C3%A8me_du_voyageur_de_commerce

— https://www.cambridge.org/core/journals/mathematical-proceedings-of-the-cambridge-philosophical-society/article/abs/shortest-path-through-many-points/F1C28B5730B94887F4659FCBF8A1F2BB

— https://en.wikipedia.org/wiki/Held%E2%80%93Karp_algorithm

6.2 Documents vidéos :

— https://www.youtube.com/watch?v=yCv2N7wGDCw

— https://www.youtube.com/watch?v=MxI78mpq_44

— https://www.youtube.com/watch?v=e0ZHDK4DSEI&list=PLWoShwK0FEjovcc32x9LbpDTf8pquPimV

— https://www.youtube.com/playlist?list=PLWoShwK0FEjovcc32x9LbpDTf8pquPimV