

Christophe ANCEY

LABORATOIRE HYDRAULIQUE ENVIRONNEMENTALE (LHE)

École Polytechnique Fédérale de Lausanne

Ecublens

CH-1015 Lausanne

Simulations stochastiques

Application aux écoulements géophysiques et à la turbulence

Version 1 du 23 février 2005

Table des matières

1	Quelques notions utiles : variables & fonctions aléatoires	7
1.1	Définitions	7
1.1.1	Propriétés de base	7
1.1.2	Moyenne et variance empiriques	8
1.2	Quelques théorèmes importants	8
1.2.1	L'inégalité de Markov	8
1.2.2	L'inégalité de Chebyshev	8
1.2.3	Loi faible des grands nombres	8
1.3	Quelques distributions discrètes	9
1.3.1	Variables aléatoires binômiales	9
1.3.2	Variables aléatoires de Poisson	10
1.3.3	Variables aléatoires géométriques	10
1.4	Quelques distributions continues	10
1.4.1	Distribution exponentielle	10
1.4.2	Distribution de Poisson et variables aléatoires Gamma	10
1.4.3	Fonctions aléatoires	11
2	Chaînes de Markov	13
2.1	Définitions	13
2.1.1	Définition générale	13
2.1.2	Cas d'un espace d'état fini ou dénombrable	13
2.1.3	Mesure ergodique ; mesure réversible	14
2.1.4	Cas d'un espace d'état infini	15
2.2	Propriétés de la matrice de transition	15
2.2.1	Principaux résultats	15
2.2.2	Un exemple	16
2.2.3	Problématique d'utilisation des chaînes de Markov	16
2.3	Processus de saut	17
2.3.1	Processus de Poisson	17
2.4	Processus de Markov et équation de Chapman-Kolmogorov	18

2.4.1	Définition	18
2.4.2	Equation de Chapman-Kolmogorov	18
2.4.3	Equation de Chapman-Kolmogorov sous forme différentiable et équation de Fokker-Planck	19
2.4.4	Equation de Kolmogorov progressive	20
3	Algorithmes stochastiques de simulation	21
3.1	Génération de nombres aléatoires	21
3.1.1	Inversion directe	21
3.1.2	Méthode d'acceptation/rejet	21
3.2	Calcul d'intégrale	22
3.2.1	Interprétation probabiliste	22
3.2.2	L'échantillonnage pondéré (<i>Importance sampling</i>)	22
3.2.3	Approximation riemannienne	23
3.3	Minimisation d'une fonction	23
3.3.1	Méthode de Robbins-Monro	24
3.3.2	Recuit simulé (<i>simulated annealing</i>)	25
3.4	Méthodes de simulation par chaîne de Markov	25
3.5	L'algorithme d'Hastings-Metropolis	25
3.5.1	Principe	25
3.5.2	Convergence	26
3.5.3	Accélérer la convergence	26
3.5.4	Application pour un espace fini	27
3.5.5	Un exemple de génération de densité	27
3.5.6	Un exemple de minimisation	29
3.6	L'échantillonnage de Gibbs	30
3.6.1	Philosophie	30
3.6.2	Une autre formulation	30
3.6.3	Recuit simulé ou <i>simulated annealing</i>	31
4	Processus de Markov à saut avec des états continus ou discrets	33
4.0.4	Equation de Chapman-Kolmogorov et définitions	33
4.0.5	Equation d'évolution	35
4.0.6	Les processus complètement homogènes	35
4.1	Méthodes de simulation numérique	35
4.1.1	Exemple : cinétique chimique	36
5	La méthode PDF pour traiter la turbulence	37
5.0.2	Quelques notions sur la détermination des lois de variation des probabilités du système	37

5.0.3	La classe de modèles dits « Langevin généralisé »	39
5.0.4	Relation entre une formulation lagrangienne et une formulation eu- lérienne	39
5.0.5	Formulation lagrangienne	39

Chapitre 1

Quelques notions utiles : variables & fonctions aléatoires

1.1 Définitions

On note ci-après \mathbb{P} la probabilité d'observer un événement. Quand cela n'est pas indiqué, il s'agit d'une densité de probabilité (variable aléatoire continue) ou bien une masse (variable aléatoire discrète); \mathbb{P} doit vérifier : $\int \mathbb{P}(x) dx = 1$. Sinon, on parle de fonction de répartition pour désigner la probabilité de non-dépassement : $\text{Prob}(x \leq X) = \int_0^x dx \mathbb{P}(x)$.

On introduit la *fonction indicatrice* sur un ensemble \mathcal{D} :

$$\mathbb{I}_{\mathcal{D}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \mathcal{D} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

1.1.1 Propriétés de base

La *moyenne* ou espérance se définit pour une variable discrète comme :

$$\mathbb{E}(X) = \sum_n x_n \mathbb{P}(X = x_n)$$

Pour une variable continue de densité de probabilité $f(x)$ on a de même : $\mathbb{E}(X) = \int_{\mathbb{R}} x f(x) dx$.

La *variance* est définie comme : $\text{Var}(x) = \mathbb{E}[(x - \mu)^2] = \mathbb{E}[x^2] - \mu^2$ pour une variable aléatoire de moyenne μ .

La *moyenne conditionnelle* de X sachant Y est définie comme :

$$\mathbb{E}(X|Y = y) = \sum_n n \text{Prob}[X = n|Y = y] = \frac{\sum_n n \text{Prob}[X = n, Y = y]}{\text{Prob}[Y = y]}$$

A noter que $\mathbb{E}(X|Y = y)$ est à son tour une variable aléatoire de moyenne : $\mathbb{E}[\mathbb{E}(X|Y = y)] = \mathbb{E}(X)$. Pour une variable continue, on a à l'identique :

$$\mathbb{E}(X|Y = y) = \int_{\mathbb{R}} x \text{Prob}[X = x|Y = y] dx = \frac{\int_{\mathbb{R}} dx x \text{Prob}[X = x, Y = y]}{\text{Prob}[Y = y]} = \frac{\int_{\mathbb{R}} dx x f(x, y)}{\int_{\mathbb{R}} dy f(x, y)}$$

si $f(x,y)$ désigne la probabilité jointe d'observer x et y . La *variance conditionnelle* se définit comme étant :

$$\text{Var}(X|Y) = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X|Y])^2]$$

C'est une fonction de Y . On montre facilement que : $\text{Var}(X|Y) = \mathbb{E}[X^2|Y] - (\mathbb{E}[X|Y])^2$. On obtient aussi la formule de la variance conditionnelle :

$$\text{Var}(X) = \mathbb{E}[\text{Var}(X|Y)] + \text{Var}[\mathbb{E}(X|Y)]$$

1.1.2 Moyenne et variance empiriques

Supposons que l'on ait un échantillon $X_1 \dots X_n$ de valeurs. La moyenne arithmétique :

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^n \frac{X_i}{n}$$

est la moyenne de l'échantillon. Quand la moyenne $\mathbb{E}[X]$ de la population dont est extrait l'échantillon est inconnue, cette moyenne empirique en fournit une estimation. Parce que l'on a $\mathbb{E}[\bar{X}] = \mathbb{E}[X]$, on dit qu'il s'agit d'un estimateur non biaisé.

Pour la variance, il faut adopter une définition un peu différente pour que l'estimateur ne soit pas biaisé :

$$S_n^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n - 1}$$

1.2 Quelques théorèmes importants

Nous regroupons ici un certain nombre de théorèmes importants, notamment pour la modélisation par simulation de Monte Carlo.

1.2.1 L'inégalité de Markov

Si X est une variable aléatoire positive alors pour tout $a > 0$:

$$\mathbb{P}(x \geq a) \leq \frac{\mathbb{E}(x)}{a}$$

1.2.2 L'inégalité de Chebyshev

C'est un corollaire de l'énoncé précédent : Si X est une variable aléatoire de moyenne μ et de variance σ^2 , alors la probabilité que X soit loin de sa valeur moyenne est bornée. Pour tout $k > 0$

$$\mathbb{P}(|x - \mu| \geq k\mu) \leq \frac{1}{k^2}$$

1.2.3 Loi faible des grands nombres

La dernière inégalité est utile à montrer la loi faible des grands nombres, base de la méthode de Monte Carlo : Soit $X_1, X_2, \dots X_n$ une séquence de variables indépendantes

distribuées selon une loi de moyenne μ et de variance finie σ^2 , alors pour tout $\varepsilon >$, on a :

$$\mathbb{P}\left(\left|\frac{X_1 + \dots + X_n}{n} - \mu\right| > \varepsilon\right) \rightarrow 0 \text{ quand } n \rightarrow \infty$$

Le théorème central limite précise que si l'on la variable réduit $Z_n = \sqrt{n}/\sigma(\bar{X}_n - \mu)$, alors la suite $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge en loi vers la loi normale $\mathcal{N}(0,1)$. Autrement dit :

$$\forall a, b (-\infty \leq a < b \leq +\infty) \lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob}[a < Z_n < b] = \int_a^b dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$$

Le théorème central limite permet de formaliser l'intervalle de confiance en définissant la précision avec laquelle la moyenne empirique \bar{X} tend vers la moyenne μ . On peut affiner la définition de l'intervalle de confiance à l'aide du théorème suivant :

En plus de hypothèses précédentes, on introduit $S_n^2 = (X_1^2 + \dots + X_n^2)/(n-1) - \bar{X}_n^2$ (écart-type empirique). Soit α un réel (petit) et z_α le réel tel que :

$$\int_{-z_\alpha}^{z_\alpha} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} = 1 - \alpha$$

On pose :

$$\begin{aligned} T_1 &= \bar{X} - \frac{z_\alpha \sigma}{\sqrt{n}} & T'_1 &= \bar{X} - \frac{z_\alpha \sqrt{S_n^2}}{\sqrt{n}} \\ T_2 &= \bar{X} + \frac{z_\alpha \sigma}{\sqrt{n}} & T'_2 &= \bar{X} + \frac{z_\alpha \sqrt{S_n^2}}{\sqrt{n}} \end{aligned}$$

alors

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob}[T_1 \leq \mu \leq T_2] = \lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob}[T'_1 \leq \mu \leq T'_2] = 1 - \alpha$$

Par exemple, quand on parle de l'intervalle de confiance à 95%, cela revient à prendre $z_\alpha = 1,96$. Cela revient à dire qu'il y a 95 % de chances que les valeurs se trouvent dans un intervalle centré sur \bar{X} et n'en diffèrent pas plus de $1,96S_n/\sqrt{n}$.

Quand on fait des essais avec une variable aléatoire, on peut approcher sa moyenne en prenant :

$$\mu \approx \bar{X} \pm \frac{z_\alpha \sqrt{S_n^2}}{\sqrt{n}}$$

La convergence est plutôt lente (en $n^{-1/2}$) mais il est possible d'accélérer les choses en tentant de réduire la variance σ^2 .

1.3 Quelques distributions discrètes

1.3.1 Variables aléatoires binômiales

Supposons que l'on ait à faire n essais indépendants. La probabilité d'avoir un essai « réussi » est de p . Sur n essais, X représente le nombre de succès. La masse de probabilité de X est la loi binômiale :

$$\mathbb{P}(X = i) = \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i}$$

avec $\binom{n}{i} = \frac{n!}{i!(n-i)!}$.

Lorsque $n = 1$, X est dite une *variable de Bernoulli*. On a : $\mathbb{E}(X) = p$ et $\text{Var}(X) = p(1-p)$.

1.3.2 Variables aléatoires de Poisson

C'est la loi dont la densité de probabilité est :

$$\mathbb{P}(X = i) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^i}{i!}$$

avec $\lambda > 0$. Cette loi est l'approximation de la loi binômiale quand $p \rightarrow 0$ et n grand. On a $\mathbb{E}(X) = \lambda$.

1.3.3 Variables aléatoires géométriques

Reprenons l'exemple de la loterie avec p chances de tirer un bon essai. Le nombre d'essai qu'il faut réaliser jusqu'à obtenir un essai réussi est noté X et sa densité de probabilité est :

$$\mathbb{P}(X = i) = p(1 - p)^{i-1}$$

On a $\mathbb{E}(X) = 1/p$ et $\text{Var}(X) = (1 - p)/p^2$.

1.4 Quelques distributions continues

1.4.1 Distribution exponentielle

C'est une loi dont la densité de probabilité est :

$$\text{Prob}(x) = \lambda e^{-\lambda x}$$

avec $\lambda > 0$. On a $\mathbb{E}(X) = 1/\lambda$ et $\text{Var}(X) = 1/\lambda^2$. Cette distribution possède des propriétés remarquables, dont d'être sans mémoire, c'est-à-dire que si s et t désignent deux instants (positifs) alors :

$$\text{Prob}(x > s + t | x > t) = \text{Prob}(x > s)$$

1.4.2 Distribution de Poisson et variables aléatoires Gamma

Supposons que des événements se produisent à des temps aléatoires. On appelle $N(t)$ le nombre d'événements survenus jusqu'à l'instant t . On dit que ces événements constituent un *processus de Poisson* de taux λ si :

- $N(0) = 0$
- le nombre d'événements se produisant en des temps disjoints sont indépendants
- la distribution du nombre d'événements ne dépend que de l'intervalle de temps et non du temps absolu où se situe cet intervalle
- $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbb{P}(N(h)=1)}{h} = \lambda$ (la probabilité d'observer un événement dans un petit intervalle de temps h est λh)
- $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbb{P}(N(h) \geq 2)}{h} = 0$ (la probabilité d'observer deux événements dans un petit intervalle de temps h est nulle).

On a: $\mathbb{E}(X(t)) = \lambda t$. On montre que le temps entre deux événements est distribué selon une loi exponentielle de distribution $e^{-\lambda t}$. La probabilité que le $n^{\text{ième}}$ événement ait lieu à un instant t est donnée par la loi de Gamma de paramètres (n, λ) :

$$\lambda e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^{n-1}}{(n-1)!}$$

Du point de vue de la simulation, une faiblesse des processus de Poisson est liée à l'hypothèse que les événements ont la même probabilité de se produire pour des intervalles de temps de même durée. On peut relaxer cette hypothèse à l'aide des processus dit *non-homogènes* ou instationnaires. Si les événements se produisent de manière aléatoire, $N(t)$ constitue un processus de Poisson non homogène d'intensité $\lambda(t)$ si:

- $N(0) = 0$
- le nombre d'événements se produisant en des temps disjoints sont indépendants
- la distribution du nombre d'événements ne dépend que de l'intervalle de temps et non du temps absolu où se situe cet intervalle
- $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbb{P}(\text{exactement un événement entret et } t+h)}{h} = \lambda(t)$ (la probabilité d'observer un événement dans un petit intervalle de temps h est $\lambda(t)h$)
- $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbb{P}(\text{deux événements ou plus entret et } t+h)}{h} = 0$ (la probabilité d'observer deux événements dans un petit intervalle de temps h est nulle).

1.4.3 Fonctions aléatoires

Une fonction aléatoire $U(x,t)$ peut se caractériser à l'aide de sa densité de probabilité. Lorsqu'elle est stationnaire (c'est-à-dire lorsque $\langle U(x,t) \rangle = 0$) alors l'autovariance $R(s)$, ou sous une forme normalisée la fonction d'autocorrélation $\rho(s)$, sert à décrire la fonction:

$$R(s) = \langle u(t)u(t+s) \rangle$$

$$\rho(s) = \frac{\langle u(t)u(t+s) \rangle}{\langle u^2(t) \rangle}$$

où $u(t) = U(t) - \langle U(t) \rangle$ désigne la fluctuation par rapport à la valeur moyenne. La figure 1 donne un exemple de fonction aléatoire variée très rapidement. L'échelle intégrale de temps permet de donner un ordre de grandeur du temps de corrélation entre deux instants:

$$\tau = \int_0^\infty \rho(s) ds$$

On introduit aussi le spectre de fréquence en prenant la transformée de Fourier de l'autocovariance (cela est aussi le résultat du théorème de Wiener-Khinchin):

$$E(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R(s) e^{-i\omega s} ds = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty R(s) \cos(\omega s) ds$$

qui est une fonction réelle paire. Une propriété fondamentale du spectre de fréquence est que l'intégrale:

$$\int_{\omega_1}^{\omega_2} E(\omega) d\omega$$

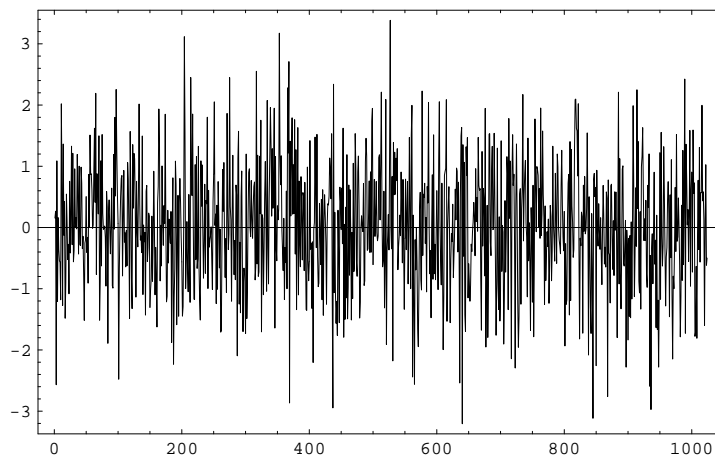


Figure 1.1 : Exemple de fonction aléatoire.

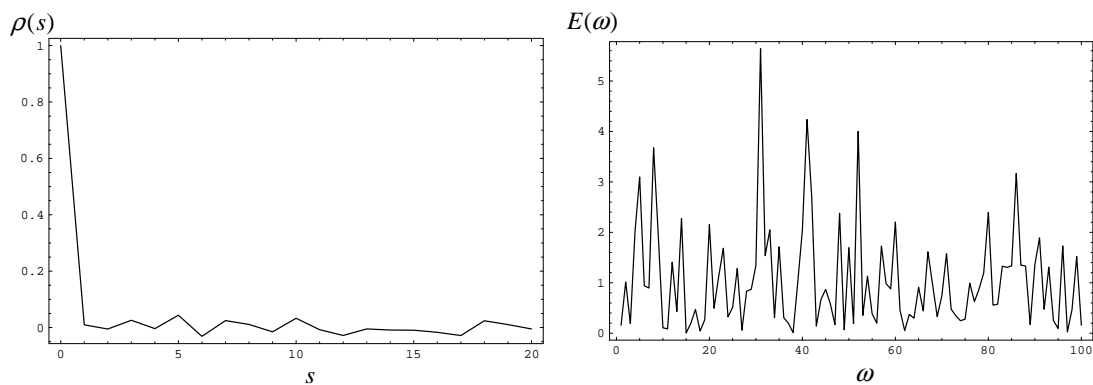


Figure 1.2 : Autocorrélation et spectre.

représente la contribution à la variance $\langle u^2(t) \rangle$ de tous les modes dans la gamme de fréquence $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$. On montre par ailleurs que :

$$\tau = \frac{\pi E(0)}{2 \langle u^2 \rangle}$$

Attention, la fonction d'autocorrélation et la densité de probabilité ne caractérisent pas complètement les variations d'une fonction aléatoire. Un processus aléatoire stationnaire a une variance constante et donc ne tend pas vers 0 quand $t \rightarrow \infty$. En conséquence, on ne peut pas définir sa transformée de Fourier. Une autre manière de calculer (ou de définir) le spectre est :

$$E(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \mathcal{F}(x) \mathcal{F}(x)^*$$

où $\mathcal{F}(x)$ désigne la transformée de Fourier de x et le signe $*$ indique qu'on a pris le conjugué.

Chapitre 2

Chaînes de Markov

Les chaînes de Markov sont la version discrète des processus de Markov qui opèrent sur des variables continues. Une chaîne de Markov est usuellement définie comme une suite de valeurs aléatoires pour lesquelles l'état présent ne dépend que du passé immédiat, c'est-à-dire le dernier visité.

2.1 Définitions

2.1.1 Définition générale

La définition la plus générale d'une *chaîne de Markov* sur un espace mesurable E est la suivante: $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov s'il existe une application Φ telle que: $X_{n+1} = \Phi(X_n, n, U_n)$, avec $(U_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées.

Il existe plusieurs cas particuliers importants :

- si Φ ne dépend pas de n , la chaîne est dite *homogène* ;
- si Φ ne dépend pas de X_n , la chaîne est une suite de variables indépendantes ;
- si Φ ne dépend pas de U_n , Φ définit un système itératif et la chaîne forme une suite récurrente.

La « propriété forte » de Markov s'énonce de la manière suivante :

$$\mathbb{P}[X_{n+1} | X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n] = \mathbb{P}[X_{n+1} | X_n = i_n]$$

Cette propriété d'oubli du passé constitue la définition classique des chaînes de Markov.

2.1.2 Cas d'un espace d'état fini ou dénombrable

Considérons une variable d'état x_i , indicé par $i = 1, 2, \dots$, qui décrit l'état du système à l'instant i . On admet que le système a N états possibles. La suite $x_n, n \geq 0$ constitue une chaîne de Markov si, indépendamment de toute son histoire, la probabilité que le système passe d'un état i à un état j est P_{ij} ; la probabilité P_{ij} est la probabilité de transition et la matrice correspondante s'appelle *la matrice de transition*. Notons que l'on doit avoir la condition de normalité suivante :

$$\sum_{j=1}^N P_{ij} = 1$$

Cela signifie que le vecteur unité $\mathbf{1}$ est vecteur propre de P associé à la valeur propre 1. Les vecteurs propres de tP associés à la valeur propre 1 sont les états d'équilibre de la chaîne.

On parle de *chaîne irréductible* lorsque les termes P_{ij} sont positifs, ce qui signifie que lorsque le système est dans un état i , il existe une probabilité non nulle d'observer une transition vers un état j . On montre alors qu'on peut introduire une grandeur π_j , appelée *probabilité stationnaire*, qui représente la proportion (sur un long laps de temps) du temps pendant lequel le système est dans l'état j , que cette grandeur est constante et indépendante des conditions initiales, et qu'elle est l'unique solution du système :

$$\pi_j = \sum_{i=1}^N P_{ij}\pi_i \quad (2.1)$$

$$\sum_{j=1}^N \pi_j = 1 \quad (2.2)$$

Une propriété importante en découle : soit h une fonction qui prend ses valeurs dans la gamme des valeurs d'état possible. Alors on a :

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) = \sum_{j=1}^N \pi_j h(j) \quad (2.3)$$

La probabilité π_j est également interprétée comme la probabilité limite que le système soit à l'état j . Pour mieux fonder cette interprétation, il est nécessaire d'introduire la notion de *chaîne apériodique*. Une chaîne irréductible de Markov est dite apériodique si pour un certain $n \geq 0$ et pour un certain état j , on a : $P(x_n = j | x_0 = j) > 0$ et $P(x_{n+1} = j | x_0 = j) > 0$. Dans ce cas, on montre qu'effectivement on a :

$$\pi_j = \lim_{n \rightarrow +\infty} P(x_n = j)$$

2.1.3 Mesure ergodique ; mesure réversible

Soit η_0 la densité de probabilité de l'élément initial de la chaîne. On dit que la chaîne X est ergodique quand η_n , densité de probabilité de X_n , tend vers la mesure stationnaire quel que soit l'élément initial :

$$\eta_n = (P_{n1}, \dots, P_{nN}) \rightarrow \pi = (\pi_j)_{1 \leq j \leq N} \text{ pour tout } \eta_0$$

Quand on a $\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$ pour tout $i \neq j$, alors la chaîne de Markov est dite *temporellement réversible*. En effet sous cette condition, si un état initial est choisi selon les probabilités π_j , alors partant de n'importe quelle position dans la chaîne et remontant le temps, on crée une chaîne qui est encore de Markov, avec une probabilité de transition P_{ij}^1 . Une autre propriété importante est qu'une chaîne qui est π -réversible vérifie :

$$\mathbb{P}[X_t = i \text{ et } X_{t+1} = j] = \mathbb{P}[X_t = j \text{ et } X_{t+1} = i]$$

Si la loi de x_0 est π alors les variables x_n ont la même distribution : la chaîne de Markov est à l'équilibre.

1. Plus globalement, si $(x_n, n \in \mathbb{Z})$ est une suite de variables aléatoires telles que pour tout $k \in \mathbb{Z}$ la suite $(x_{n+k}, n \geq 0)$ soit une chaîne de Markov de matrice de transition P et de loi initiale π , alors la suite $(x_{-n}^*, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov de loi initiale π et de matrice de transition P^* définie par : $P_{ij}^* = \pi_j P_{ji} / \pi_i$. Une chaîne de Markov est réversible si la matrice de transition de la chaîne renversée est identique à celle de la chaîne initiale : $P = P^*$.

2.1.4 Cas d'un espace d'état infini

Comme précédemment, on parle de chaîne de Markov pour désigner une suite de variables aléatoires, dont la valeur à un instant n dépend uniquement du passé immédiat :

$$\mathbb{P}[X_n \in dy | X_{n-1} = x] = K_n[x, dy]$$

où dy désigne un voisinage infinitésimal du point y et K_n s'appelle la *probabilité de transition*.

La variable X_n est distribuée selon la loi η_n : $\eta_n(dy) = \int \eta_{n-1}(dx)K_n(x, dy)$. Si la chaîne est homogène (i.e., $K_n = K$) alors la limite η_∞ est le point fixe de l'application :

$$\eta_\infty = \int \eta_\infty(dx)K(x, dy)$$

Dans ce cas la distribution de probabilité $\pi = \eta_\infty$ est appelée la *mesure invariante* ou *stationnaire* de la chaîne de Markov. Le comportement asymptotique des mesures η_n est un problème majeur étudié dans la théorie des chaînes de Markov.

On dit que la chaîne est ergodique si la limite de la chaîne ne dépend pas des conditions initiales :

$$\eta_n(x) \rightarrow \pi(x) \text{ quelle que soit la densité } \eta_0$$

On dit que la chaîne est réversible quand :

$$\forall(x, y)K(x, y)\pi(y) = K(y, x)\pi(x)$$

Il est équiprobable (i) de tirer d'un état x à partir de la mesure stationnaire puis de faire une transition vers un autre état y et (ii) de partir d'un état quelconque y et d'arriver à l'état x . On dit aussi que K vérifie une *balance détaillée* (detailed balance). Cette propriété est très intéressante car, si on parvient à la montrer, alors on montre que l'invariance de la loi π vis-à-vis du noyau de transition K et donc que la chaîne de Markov associé tend bien vers une limite (c'est une condition suffisante de convergence mais ce n'est pas une condition nécessaire).

2.2 Propriétés de la matrice de transition

2.2.1 Principaux résultats

Si P est la matrice de transition d'une chaîne de Markov, alors :

- les valeurs propres sont toutes de module inférieur à 1 ;
- si la valeur propre est de multiplicité 1 alors la matrice est irréductible ;
- si la chaîne de Markov est irréductible et apériodique alors la seule valeur propre de module 1 est 1.

Un état est dit *récurrent* s'il est visité un nombre infini de fois. Dans le cas contraire, il est dit *transient*.

On appelle *temps de retour* T_x à l'état x le temps : $T_x = \inf n > 0 : x_n = x$. Le nombre moyen de visites de l'état j en partant de i est $G_{ij} = \sum_{n \geq 0} P_{ij}^n$. On montre que si l'état i est récurrent alors $G_{ij} = +\infty$; dans le cas contraire, s'il est transient, alors $G_{ij} < +\infty$.

Si une chaîne de Markov est irréductible alors les éléments sont soit tous transients soit tous récurrents. Si l'espace d'état est fini et la chaîne de Markov est irréductible alors tous les états sont récurrents.

Les probabilités stationnaires π_i sont les vecteurs propres (à droite) de P puisque $\pi_i = \pi_i P_{ij}$. Si une chaîne de Markov (x_n) à espace d'état fini est réversible, irréductible, et apériodique, la matrice :

$$M = \sqrt{\frac{\pi_i}{\pi_j}} P_{ij}$$

est symétrique, diagonalisable, et ses valeurs propres β_i sont telles $|\beta_i| \leq 1$ et sont également les valeurs propres de P .

Deux autres résultats importants sont :

- à partir de n'importe quelle matrice de transition P et n'importe quelle mesure stationnaire π strictement positive, on est capable de « symétriser » P pour la rendre réversible. En effet, la matrice $Q = (P + P^*)/2$, avec $P^* = D^{-2} P D^2$ avec $D = \text{diag} \sqrt{\pi_i}$, est π -réversible.
- A partir d'une mesure stationnaire π , on peut définir une matrice de transition qui soit π -réversible. Il suffit de se donner une matrice Q quelconque mais vérifiant $Q_{ij} > 0 \leftarrow Q_{ji} > 0$. La matrice P définie comme :

$$P_{ij} = Q_{ij} \min \left[1, \frac{\pi_j Q_{ji}}{\pi_i Q_{ij}} \right] \text{ si } Q_{ij} \neq 0 \\ = 0 \text{ sinon}$$

Le dernier résultat est la base de l'algorithme de Metropolis.

2.2.2 Un exemple

On considère un graphe avec 5 sommets numérotés de 1 à 5. L'état du système est la position du point sur le graphe ; l'espace d'état est donc $\{1, 2, 3, 4, 5\}$. La probabilité de transition est définie par $p_{ij} = 0$ si i et j ne sont pas reliés par une arête et $p_{ij} = d_i^{-1}$ sinon (avec d_i le nombre d'arêtes de sommet i). Pour le graphe ci-contre on a :

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

On pose $\pi_i = C d_i$ où C est la constante de normalisation : $C^{-1} = \sum_i d_i^{-1}$, soit ici $C = 12/31$ et $\pi = 12/31 * \{2, 3, 4, 2, 1\}$. On vérifie facilement que l'on a : $\pi = \pi \cdot P$. Pour des sommets voisins $\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$, ce qui montre que la chaîne est réversible.

A noter dans cet exemple que la chaîne de Markov ne traduit pas nécessairement l'évolution d'une particule ; ici ce qui a été utilisé pour la détermination de la probabilité de transition est la notion de voisin : il faut repérer les voisins pour définir la probabilité de transition.

2.2.3 Problématique d'utilisation des chaînes de Markov

Deux types de situations importantes se rencontrent :

- on connaît K_n et le problème est de préciser le comportement à long terme du

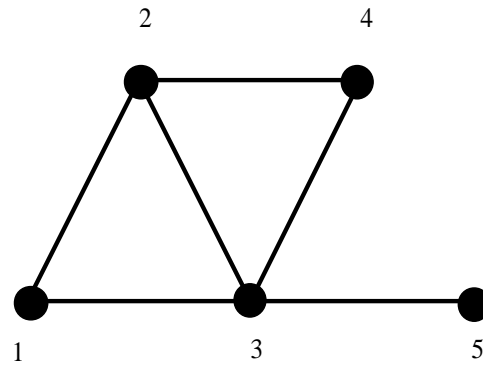


Figure 2.1 : Marche aléatoire sur un graphe.

système. Généralement cette étude est basée sur des arguments topologiques de type « point fixe » (par exemple en vérifiant l'existence de fonction de Lyapunov dans la compacité des séquences de probabilité) ou des descriptions de type Bott-Mayberry (pour un espace fini) ;

- on connaît la mesure invariante et on cherche à définir une chaîne de Markov ayant un tel comportement asymptotique. La transition de Metropolis-Hastings est un exemple de méthode.

2.3 Processus de saut

2.3.1 Processus de Poisson

La loi exponentielle de paramètre λ est une distribution sur \mathbb{R}_+ dont la densité est : $\lambda e^{-\lambda x}$. On fixe une suite (A_n) de variables aléatoires exponentielles de paramètre λ . On définit les sommes partielles de la façon suivante :

$$t_n = \sum_{i=1}^n A_i$$

Pour $t \geq 0$,

$$X(t) = \sup\{n / t_n \leq t\}$$

est appelé *processus de Poisson* de paramètre λ . C'est un processus croissant dont les sauts valent 1 et le temps entre deux sauts est une variable exponentielle de paramètre λ . L'équation de Chapman-Kolomogorov s'écrit pour ce processus :

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = \lambda p_{i-1}(t) - \lambda p_i(t)$$

On se donne

- $P = p(x, y)$ une matrice de transition d'une chaîne de Markov telle que $p(x, x) = 0$,
- q_x une suite de réels strictement positifs

on définit la suite croissante (t_n) de la façon suivante : $t_0 = 0$ et $t_{n+1} = t_n + E_{n+1}$ ou la loi de $(E_n | X_n)$ est une variable exponentielle de paramètre q_{X_n} . On pose : $X(t) = X_n$ si $t_n \leq t \leq t_{n+1}$. Un tel processus est appelé un processus de sauts. La matrice de saut est définie par :

$$q(x, y) = q_x p(x, y) \text{ si } x \neq y$$

$$q(x, x) = -q_x$$

La matrice Q vérifie $\sum q(x, y) = 0$.

2.4 Processus de Markov et équation de Chapman-Kolmogorov

2.4.1 Définition

On introduit la probabilité (plus exactement la densité de probabilité jointe) d'observer une particule qui soit en $x = x_1$ à l'instant $t = t_1$, en $x = x_2$ à l'instant $t = t_2$, etc. (avec $t_1 > t_2 > \dots > t_n$) :

$$\Phi_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) \quad (2.4)$$

On peut également introduire la probabilité d'observer la particule occuper n positions à n instants différents conditionnellement au fait que la particule occupe à p autres instants :

$$\Phi_{n|p}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}; \dots; x_{n+p}, t_{n+p}) = \quad (2.5)$$

$$\frac{\Phi_{n+p}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{n+p}, t_{n+p})}{\Phi_p(x_{n+1}, t_{n+1}; \dots; x_{n+p}, t_{n+p})} \quad (2.6)$$

Un processus est dit *markovien* si le terme conditionnel ne fait apparaître que le terme le plus récent, c'est-à-dire que la probabilité à un instant donné ne dépend pas de toute l'histoire du système mais uniquement du dernier état visité par le système (ou dit autrement, de son histoire récente) :

$$\Phi_{n|p}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}; \dots; x_{n+p}, t_{n+p}) = \quad (2.7)$$

$$\Phi_{n|p}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}) \quad (2.8)$$

Cela a pour répercussion importante que la probabilité jointe $\Phi_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$ est entièrement déterminée par Φ_2 :

$$\begin{aligned} & \Phi_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = \\ & \Phi_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) \Phi_{1|1}(x_2, t_2 | x_3, t_3) \dots \Phi_{1|1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) \Phi_1(x_n, t_n) \end{aligned} \quad (2.9)$$

avec :

$$\Phi_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) = \frac{\Phi_2(x_1, t_1; x_2, t_2)}{\Phi_1(x_2, t_2)}$$

La probabilité conditionnelle $\Phi_{1|1}$ est interprétée comme la probabilité de transition d'un état donné à un autre état : $\Phi_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$ donne la probabilité que la particule se trouve en $x = x_1$ à l'instant $t = t_1$ sachant qu'à un instant ultérieur $t_2 < t_1$ elle était en $x = x_2$.

2.4.2 Equation de Chapman-Kolmogorov

Une propriété importante en découle : c'est l'équation de *Chapman-Kolmogorov*. Considérons la probabilité jointe d'observer la particule en trois endroits successifs :

$$\Phi_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) = \Phi_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) \Phi_2(x_2, t_2; x_3, t_3) \quad (2.10)$$

Après quelques manipulations basiques, on trouve que :

$$\Phi_{1|1}(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \int dx_2 \Phi_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) \Phi_{1|1}(x_2, t_2; x_3, t_3) \quad (2.11)$$

ce qui signifie que lorsqu'une particule partant de x_3 arrive en x_1 , on peut décomposer le chemin en deux étapes : la transition d'un état $x_3 \rightarrow x_2$ suivie de $x_2 \rightarrow x_1$.

2.4.3 Equation de Chapman-Kolmogorov sous forme différentiable et équation de Fokker-Planck

L'équation de Chapman-Kolmogorov est d'autant plus intéressante qu'on peut la mettre sous une autre forme, différentiable, dans laquelle on s'intéresse à des intervalles de temps $\Delta t = t_1 - t_2 \rightarrow 0$. Par exemple, dans le cas de processus discontinus, on écrit :

$$\Phi_{1|1}(x_1, t_2 + \Delta t | x_2, t_2) = A\delta(x_1 - x_2) + \delta t W_{t_2}(x_1 | x_2) \quad (2.12)$$

où $W_{t_2}(x_1 | x_2)$ désigne la probabilité de transition par unité de temps d'un état x_2 à x_1 . La condition de normalisation entraîne par ailleurs que :

$$A = 1 - \delta t \int dx_1 W_{t_2}(x_1 | x_2)$$

Après un passage à la limite $\delta t \rightarrow 0$, on obtient :

$$\partial_t \Phi_{1|1}(x, t | x'', t'') = \int dx' W_t(x | x') \Phi_{1|1}(x', t | x'', t'') - \Phi_{1|1}(x, t | x'', t'') \int dx' W_t(x' | x) \quad (2.13)$$

ou encore, après une nouvelle intégration, on arrive à une forme plus facile à interpréter, qui est appelée *équation maître* (*master equation* en anglais), équation au cœur des processus discrets :

$$\partial_t \Phi_1(x, t | x'', t'') = \int dx' [W_t(x | x') \Phi_1(x', t) - W_t(x' | x) \Phi_1(x, t)] \quad (2.14)$$

Cette équation décrit les pertes et les gains ; il y a deux raisons d'observer un changement de position de la particule :

- il y a une probabilité proportionnelle à $W_t(x | x')$ que la particule quitte sa position x pour atteindre une position x' ;
- inversement, il y a une probabilité proportionnelle à $W_t(x' | x)$ qu'une particule en x' atteigne la position x .

Cela peut être généralisé aux processus continus. Pour cela on pose :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| < \varepsilon} (y-x) p(t + \Delta t, y | t, x) dy = A(t, x)$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|y-x| < \varepsilon} (y-x)^2 p(t + \Delta t, y | t, x) dy = B^2(t, x)$$

Les coefficients d'ordre supérieur sont nuls. La première équation définit le coefficient (vecteur) de dérive (drift en anglais) comme l'incrément moyen du processus conditionnel X_t alors que la seconde représente la diffusion (matrice) et est définie comme la variance

de l'incrément La densité de probabilité transitionnelle est $p(x, t|x_0, t_0)$ est une fonction de deux couples de variables (x_0, t_0) et (x, t) . On peut donc considérer deux points de vue : soit on garde les conditions initiales (x_0, t_0) fixes et on examine ce qui se passe pour (x, t) soit on fait l'inverse. Dans le premier cas, le plus naturel, on montre que la probabilité de transition vérifie l'équation de Chapman-Kolmogorov sous forme progressive :

$$\partial_t p(x, t|x_0, t_0) = \int dy [W_t(x|y)p(y, t) - W_t(y|x)p(x, t)] - \frac{\partial A(x, t)p}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial B^2(x, t)p}{\partial x^2} \quad (2.15)$$

Lorsque le processus est continu (c'est-à-dire lorsque $W = 0$), l'équation prend le nom de *Fokker-Planck*. Lorsque de plus le coefficient de diffusion B est nul, l'équation prend le nom de *Liouville*. Dans ce cas, il s'agit tout simplement de la description d'un système entièrement probabiliste gouverné par l'équation :

$$\frac{dx(t)}{dt} = A[x(t), t]$$

avec pour condition initiale : $x(t_0) = x_0$. La solution de cette équation est $p(x, t|x_0, t_0) = \delta(x - x(t))$.

Une interprétation heuristique de l'équation de Fokker-Planck est la suivante : les dérivées de A et B étant petites par rapport à celles de p , on peut écrire en première approximation quand on examine ce qui se passe à un temps t voisin de t_0 :

$$\partial_t p(x, t|x_0, t_0) \approx -A(x, t) \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} B^2(x, t) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (2.16)$$

avec comme condition initiale $p(x, t|y, t) = \delta(x - y)$. La solution de cette équation est une gaussienne (pour $t = t_0 + \Delta t$ proche de t_0) de matrice de covariance B^2 et de moyenne $x_0 + A\Delta t$:

$$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\sqrt{\det B^2}}{\sqrt{\Delta t}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - x_0 - A\Delta t)^T (B^2)^{-1} (x - x_0 - A\Delta t)}{\Delta t}\right)$$

Il s'agit donc d'une particule dérivant à la vitesse A et soumise à des fluctuations gaussiennes de covariance B^2 :

$$x(t + \Delta t) = x(t) + A(x, t)\Delta t + \eta\Delta t^{1/2}$$

avec $\langle \eta(t) \rangle = 0$ et $\langle \eta^2(t) \rangle = B^2$. Notons que si la trajectoire est continue elle n'est nulle part différentiable car un terme en $\Delta t^{1/2}$ apparaît.

2.4.4 Equation de Kolmogorov progressive

Un processus de Markov X_t est le plus souvent décrit :

- à travers sa densité de probabilité $p(t, x)$;
- à suivant la trajectoire X_t en fonction de t .

On introduit un opérateur \mathcal{L}_t agissant sur une fonction g prenant ses valeurs sur le même espace que X_t et qui traduit la variation infinitésimale de g conditionnellement à $X_t = x$:

$$\mathcal{L}_t g(x) = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{\langle g(X_{t+dt}) | X_t = x \rangle - g(x)}{dt}$$

où $\langle g(X) \rangle = \int g(x)p(x)dx$.

Chapitre 3

Algorithmes stochastiques de simulation

Dans des problèmes classiques comme la minimisation d'une fonction ou le calcul d'une intégrale, il existe un certain nombre de méthodes déterministes qui permettent d'aboutir généralement au résultat avec une précision donnée ε . Tout aussi généralement, le nombre d'opérations élémentaires impliquées dans un algorithme déterministe est fonction de la taille du problème n (par exemple, le nombre de pas de discrétisation pour le calcul d'une intégrale). Typiquement, un algorithme déterministe demandera $K \log \varepsilon^{-1} n^2$ opérations contre $\varepsilon^{-2} n$ pour des algorithmes stochastiques. Si la taille du système est grande et que la précision souhaitée n'est pas très grande, un algorithme stochastique satisfera largement aux besoins.

3.1 Génération de nombres aléatoires

On ne traite ici que le cas de variables continues mais l'extension à des variables discrètes ne pose guère de problème. On recense ici deux méthodes classiques et faciles à programmer. L'algorithme de Metropolis offre un cadre plus général et universel d'obtention de variable aléatoire.

3.1.1 Inversion directe

C'est la méthode la plus simple. Soit f une densité de probabilité, F sa fonction de répartition. Si on veut simuler des nombres aléatoires tirés selon f , alors on peut tirer u selon une loi uniforme sur $[0, 1]$, puis poser $X = F^{-1}(u)$.

Par exemple, pour simuler une loi exponentielle de taux λ , il suffit de poser $X = -\ln(1 - u)$ (ou plus simple $X = -\ln u$ car u et $1 - u$ suivent la même loi).

3.1.2 Méthode d'acceptation/rejet

Dans certains cas, on ne sait pas calculer directement (analytiquement) F^{-1} ou cela demande du temps. On peut alors approcher la densité f par une fonction g plus simple telle que : $f(x) \leq cg(x)$ où c est une constante supérieure à 1 (on a en général intérêt à choisir c de telle sorte que $c = \max(f(x)/g(x))$ soit le plus petit possible). Si u est une

variable aléatoire et x une variable aléatoire tirée selon g alors la loi conditionnelle de x sachant l'événement « $cug(x) < f(x)$ » a pour densité f .

3.2 Calcul d'intégrale

3.2.1 Interprétation probabiliste

Admettons qu'on souhaite calculer :

$$I = \int_{\chi} dx f(x)g(x)$$

avec $f(x)$ une densité de probabilité. On peut interpréter I comme : $I = \mathbb{E}_f[h(x)]$. La loi forte des grands nombres nous indique que si l'on est capable de générer $x_1 \cdots x_n$ selon f , alors

$$\bar{h}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n h(x_k)$$

converge vers I . La variance est donnée par :

$$\text{Var}(h_n) = \frac{1}{n} \left(\int_{\chi} dx f(x)g^2(x) - \mathbb{E}_f^2[h(x)] \right)$$

qui peut être évaluée par :

$$v_m = \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n h^2(x_k) - \frac{\bar{h}_m^2}{m^2}$$

Pour n grand, le rapport $(\bar{h}_n - \mathbb{E}_f[h])/\sqrt{v_m}$ se comporte comme une variable aléatoire normale $\mathcal{N}(0,1)$.

♣ Admettons que l'on veuille résoudre $\int e^x dx$ sur $\chi = [0, 1]$. On identifie : $g(x) = e^x$ et f est la loi uniforme sur χ . Analytiquement on trouve $I = e - 1 \approx 1.718$. On applique une méthode déterministe (méthode des trapèzes) dont la précision est en $1/n$ et une méthode de simulation par Monte Carlo. Comme le montre la figure 3.1, la convergence est très lente. Au bout de $n = 1000$ simulations, l'écart type relatif est de $S_n/\sqrt{n} \approx 0,016$, l'intervalle de confiance à 95% est donc $\pm 1,96 \times 0.016 = 0.03$ autour de la valeur moyenne estimée (1,680).

3.2.2 L'échantillonnage pondéré (*Importance sampling*)

Une alternative à la méthode précédente est d'échantillonner selon une autre loi de probabilité. En effet, on a :

$$I = \int_{\chi} dx f(x)h(x) = \int_{\chi} dx g(x) \frac{f(x)}{g(x)} h(x) = \mathbb{E}_g \left[\frac{f(x)}{g(x)} h(x) \right]$$

dont une estimation est donnée par :

$$\tilde{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{g(x_i)} h(x_i)$$

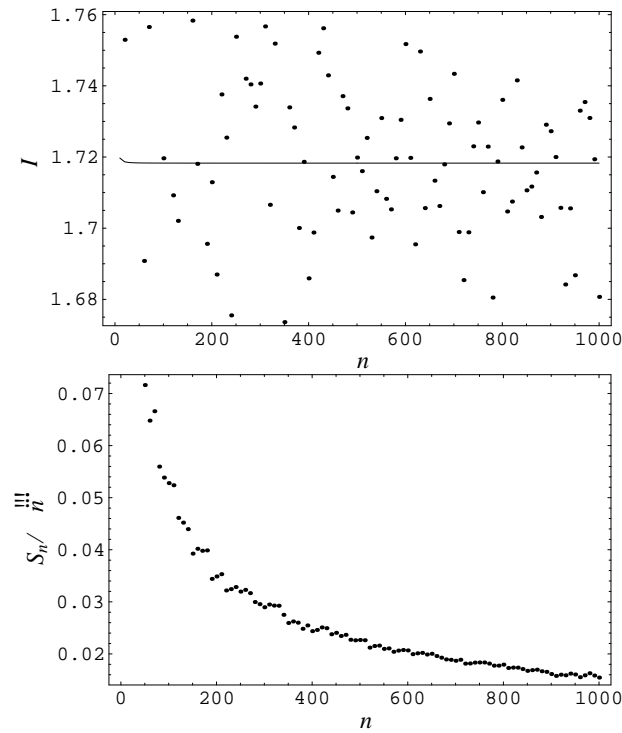


Figure 3.1 : Calcul de I . Le trait continu représente l'estimation par la méthode de Simpson tandis que les points représentent les résultats d'une simulation. Pour le dessin du bas, on a reporté le rapport S_n/\sqrt{n} en fonction du nombre de simulations n .

Pour que la variance d'un tel estimateur soit finie, il faut que $f(x)/g(x) < M, \forall x \in \chi$. et pour χ compact, il faut que f soit bornée et que $g(x) > \epsilon$. D'un point de vue pratique, on cherche des lois g telles que $|h|f/g$ soit à peu près constant.

3.2.3 Approximation riemannienne

Une approximation de I peut être obtenue en divisant un intervalle $\chi = [a, b]$ en incréments d'espace réguliers $x_i = a + i(b - a)/n$. On a alors :

$$I = \int_{\chi} dx f(x)h(x) \approx \sum_{i=0}^{n-1} h(x_i)f(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$

Une adaptation stochastique de cette estimation consiste à supposer que les x_i ne sont plus régulièrement espacés mais distribués selon f . On obtient alors une convergence plus rapide (en $1/n^2$) que précédemment.

♣ Reprenons l'exemple précédent. La figure 3.2 montre comme varie \tilde{I} en fonction du nombre de tirages n .

3.3 Minimisation d'une fonction

On cherche à minimiser la fonction h sur un ensemble χ :

$$\min_{x \in \chi} h(x) \tag{3.1}$$

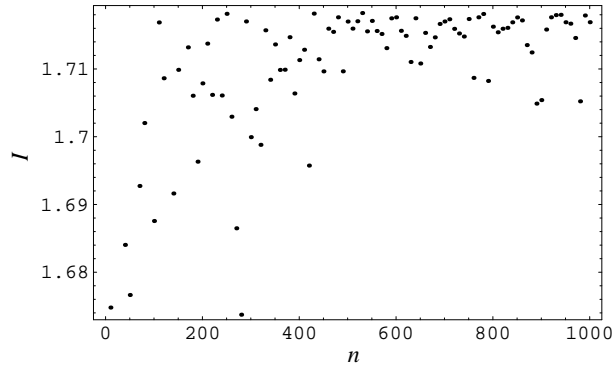


Figure 3.2 : Calcul de I par une adaptation stochastique de l'algorithme de Riemann.

D'un point de vue probabiliste, il est souvent plus intéressant de chercher le maximum d'une fonction car on peut l'interpréter comme le mode de la densité de probabilité h pour les fonctions h positives et telles que $\int_{\mathcal{X}} dx h(x) < \infty$; si ces conditions ne sont pas remplies, on peut transformer $h(x)$ en $H(x)$ telle que $H(x) = e^{h(x)}$ ou $H(x) = e^{h(x)}/(1 + e^{h(x)})$. Il suffit alors de générer des échantillons selon h et d'en chercher le mode.

3.3.1 Méthode de Robbins-Monro

La méthode du *gradient* est une méthode déterministe du problème 3.1. On construit une suite convergence vers la solution x^* du problème lorsque $-h$ est convexe :

$$x_{j+1} = x_j + \alpha_j \nabla h(x_j)$$

où α_j est une suite de nombres positifs qui tend vers zéro. Une adaptation stochastique de cet algorithme est d'introduire les variables aléatoires β_j et de définir la chaîne de Markov (non homogène) :

$$x_{j+1} = x_j + \frac{\alpha_j}{2\beta_j} \tilde{\nabla} h(x_j, \beta_j, \zeta_j) \zeta_j$$

avec ζ_j distribué uniformément sur la sphère unité et $\tilde{\nabla} h = h(x+y) - (hx-y)$ est une approximation de ∇h .

Un problème similaire est la résolution de $h(x) = a$. L'algorithme de Newton-Raphson fournit une méthode déterministe, dont l'adaptation stochastique est l'algorithme de Robbins-Monro. On construit la chaîne de Markov suivante :

$$x_{j+1} = x_j + \gamma_j (a - H(z_j, x_j))$$

où z_j est simulé suivant une loi telle que $\mathbb{E}[H(z, x)|x] = h(x)$, γ_j est une suite de nombres tels que $\sum_{j=1}^{\infty} \gamma_j = \infty$ mais $\sum_{j=1}^{\infty} \gamma_j^2 < \infty$. Par exemple, la suite

$$\gamma_j = \frac{a}{bj + c}$$

avec $(a, b, c) \in \mathbb{R}_+^3$ est un bon candidat.

L'intérêt de la méthode de Robbins-Monro apparaît lorsque l'on ne connaît pas précisément h (par exemple, des fluctuations entachent la détermination de h si on utilise une méthode déterministe) ou lorsqu'on peut écrire :

$$h(x) = \int_{\mathcal{X}} H(x, y) f(y) dy$$

où f désigne une densité de probabilité sur χ . Dans ce cas, on peut écrire : $h(x) = \mathbb{E}[H(x,y)|y]$ où y est une variable aléatoire de loi f . De telles intégrales sont en général difficiles à calculer analytiquement. Dans cette situation, on remplace la fonction délicate h par la valeur simulée $H(x_n, y_{n+1})$.

3.3.2 Recuit simulé (*simulated annealing*)

Voir le § suivant.

3.4 Méthodes de simulation par chaîne de Markov

Le principe de base des simulations de Monte Carlo par chaînes de Markov est l'utilisation d'une chaîne de Markov ergodique de loi stationnaire f : partant d'une arbitraire $x^{(0)}$, on génère une chaîne $x^{(t)}$ à partir d'un noyau de transition dont la loi stationnaire est f . Pour T assez grand, on peut considérer $x^{(T)}$ comme distribué suivant f et obtenir ainsi un échantillon $x^{(T)}, x^{(T+1)}, \dots$ qui est effectivement distribué selon f même si les $x^{(T+t)}$ ne sont pas indépendants. Il s'agit d'une technique de simulation assez lourde à mettre en œuvre mais qui est universelle.

On cherche ici à programmer une chaîne de Markov de loi initiale μ et de probabilité de passage K_n (appelée encore noyau de passage).

3.5 L'algorithme d'Hastings-Metropolis

3.5.1 Principe

C'est un algorithme reposant sur une densité conditionnelle $q(y|x)$, dite *loi instrumentale* choisie de telle sorte qu'elle est facilement simulable et soit analytique soit symétrique ($q(y|x) = q(x|y)$).

1. générer $y_t \sim q(y|x^{(t)})$
 2. prendre $x^{(t+1)} = \begin{cases} y_t & \text{avec la probabilité } \rho(x^{(t)}, y_t) \\ x^{(t)} & \text{avec la probabilité } 1 - \rho(x^{(t)}, y_t) \end{cases}$
- où $\rho(x^{(t)}, y_t) = \min \left\{ 1, \frac{f(y_t) q(x^{(t)}|y_t)}{f(x^{(t)}) q(y_t|x^{(t)})} \right\}$

Pour toute loi conditionnelle q , f est une loi stationnaire de la chaîne $x^{(t)}$ produite par l'algorithme ci-dessus. La preuve est apportée en considérant le noyau de transition $K(x, x') = \rho(x, x')q(x'|x) + (1 - \rho(x, x'))\delta_x(x')$ et en montrant que $\int K(x, A)f(x) dx = \int_A f(x')x'$.

Si on choisit une loi instrumentale q indépendante de $x^{(t)}$ (on note alors : $q(y_t|x^{(t)}) = g(y_t)$), on dit qu'il s'agit d'un algorithme de Metropolis-Hastings indépendant. On a alors :

1. générer $y_t \sim g(y)$
2. prendre $x^{(t+1)} = \begin{cases} y_t & \text{avec la probabilité } \min \left\{ 1, \frac{f(y_t) g(x^{(t)})}{f(x^{(t)}) g(y_t)} \right\} \\ x^{(t)} & \text{sinon} \end{cases}$

Cet algorithme produit une chaîne ergodique s'il existe une constante M telle que $f(x) \leq Mg(x)$.

Lorsque la loi instrumentale s'écrit sous la forme $q(y_t|x^{(t)}) = g(y_t - x^{(t)})$, la valeur précédemment utilisée sert à générer la suivante. On parle d'algorithme de Metropolis-Hastings à marche aléatoire. Ce dernier algorithme peut présenter des problèmes de convergence, notamment si le support de f est \mathbb{R} .

3.5.2 Convergence

De manière générale, le choix de la loi instrumentale g est de prime importance pour la convergence de l'algorithme. Si la loi instrumentale peut se caractériser par une échelle de longueur ϵ , alors pour une marche aléatoire de T étapes, l'état a vraisemblablement bougé d'une distance d'environ $\sqrt{T}\epsilon$. Si la longueur caractéristique de la loi à simuler est L , il faudra alors approximativement $T = (L/\epsilon)^2$ étapes pour avoir un échantillon indépendant des conditions initiales. Si le taux moyen d'acceptation est $\bar{\rho}$, alors il faut compter $(L/\epsilon)^2/\bar{\rho}$. Si on prend une petite échelle, le temps de convergence se trouve être augmenté.

Une raison pour choisir une petite échelle ϵ est que, si on fait le choix contraire, un large saut d'un point hautement probable risque d'arriver dans une zone de faible probabilité. Le taux de progrès sera lent puisque le taux d'acceptation sera faible. Il s'agit de l'estimation de la borne inférieure ; donner plus d'information sur la vitesse de convergence reste encore un sujet difficile de recherches.

Pour l'algorithme d'Hastings-Metropolis indépendant, un bon choix de g est celui qui maximise le taux moyen d'acceptation

$$\rho = \mathbb{E} \left[\min \left\{ 1, \frac{f(y_t) g(x)}{f(x) g(y_t)} \right\} \right]$$

Pour cela il faut que g reproduise aussi fidèlement que possible la loi f . Une approche empirique consiste à choisir une forme paramétrée pour la loi instrumentale $g(x|\theta)$ et à ajuster les paramètres θ en fonction du taux d'acceptation estimé.

La version « marche aléatoire » requiert une analyse du taux d'acceptation (un taux élevé ne signifie pas nécessairement que l'algorithme aille dans le bon sens car il peut signifier que la marche aléatoire se déplace trop lentement le long de f). A l'inverse, si le taux moyen est trop faible, les valeurs successives de $f(y_t)$ sont fréquemment petites par rapport à $f(x^{(t)})$, ce qui signifie que la marche aléatoire se déplace rapidement sur la surface de f . Le choix du support de g est également essentiel dans la vitesse de convergence de l'algorithme. En pratique, un taux d'acceptation moyen de 1/2 en dimension 1 ou 2 donne de bons résultats.

3.5.3 Accélérer la convergence

Il est parfois d'accélérer la vitesse de convergence. Par exemple, pour beaucoup de système, la probabilité cible est de la forme : $\pi(x) = e^{-E(x)}/Z$ avec Z le facteur de normalisation souvent difficile à calculer. Ici on peut se servir de l'énergie E mais également de son gradient pour déterminer dans quelle direction se situe un état avec une probabilité forte. Dans ce cas, une stratégie est d'augmenter l'espace des états de variables \mathbf{p} . On

introduit l'hamiltonien : $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = E(\mathbf{x}) + K(\mathbf{p})$, avec $K(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}\mathbf{p}$ l'énergie cinétique. On cherche à créer une chaîne convergeant asymptotiquement vers la densité jointe :

$$\pi_H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{e^{-H(\mathbf{x}, \mathbf{p})}}{Z_H} = \frac{1}{Z_H} e^{-E(\mathbf{x})} e^{-K(\mathbf{p})}$$

avec Z_H la constante de normalisation. On note que π_H est une densité séparable, dont une des densités marginales fournit la densité souhaitée $\pi(x) = e^{-E(x)}/Z$. En pratique :

1. on tire un état \mathbf{p} à partir de la densité gaussienne $e^{-K(\mathbf{p})}/Z_K$
2. on modifie l'état (\mathbf{x}, \mathbf{p}) par la résolution des équations :

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{x}} \end{aligned}$$

La méthode du recuit simulé fournit un exemple d'accélération de convergence en adoptant une chaîne de Markov non homogène.

3.5.4 Application pour un espace fini

Soit $(b(j), j \in \{1 \dots m\})$ une suite de nombres positifs et $B = \sum_{j=1}^m b(j)$. Admettons que l'on veuille une variable aléatoire de densité $\pi(j) = b(j)/B$. Une manière d'arriver à simuler une séquence de nombres aléatoires dont la distribution converge vers $\pi(j)$ est de trouver une chaîne de Markov facile à simuler et dont les limites stationnaires sont les valeurs $\pi(j)$. L'idée est de construire une chaîne de Markov réversible de la façon suivante.

Soit $\mathbf{Q} = (q(i,j))$ une matrice de probabilité de transition d'une chaîne irréductible opérant sur les entiers $\{1 \dots m\}$. La chaîne de Markov $(x_n, n \geq 0)$ est définie de la façon suivante : quand $x_n = i$, un nombre aléatoire x tel que $\text{Prob}(x = j) = q(i,j)$ (pour $j \in \{1 \dots m\}$), est généré. Au rang suivant $n + 1$, si $x = j$ alors x_{n+1} est donné égal à j avec une probabilité $\alpha(i,j)$ et égal à i avec une probabilité $1 - \alpha(i,j)$. La matrice de probabilité de transition est alors donnée par : $P_{ij} = q(i,j)\alpha(i,j)$ si $j \neq i$. $P_{ii} = q(i,i) + \sum_{k \neq i} q(i,k)(1 - \alpha(i,k))$ La condition pour que cette chaîne soit réversible est que : $\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$ pour $j \neq i$, ce qui est équivalent à : $\pi_i q(i,j)\alpha(i,j) = \pi_j q(j,i)\alpha(j,i)$. La solution est :

$$\alpha(i,j) = \min \left(\frac{\pi_j q(j,i)}{\pi_i q(i,j)}, 1 \right)$$

Dans ce la chaîne ainsi construite admet $\pi(j)$ comme probabilités stationnaires et limites de probabilité.

3.5.5 Un exemple de génération de densité

On cherche à simuler un échantillon de 5000 valeurs tirées selon la $\mathcal{N}(0, 1)$. Comme loi instrumentale, nous utilisons la loi de Cauchy $\mathcal{C}(a, b)$:

$$\mathbb{P}(x) = \frac{1}{b \pi \left(1 + \frac{(-a+x)^2}{b^2} \right)}$$

avec ici $a = 0$ et b un paramètre variable. On reporte sur la figure l'histogramme de l'échantillon simulé avec $b = 0,1$, $b = 1$, et $b = 10$; on note que l'échantillon le plus proche

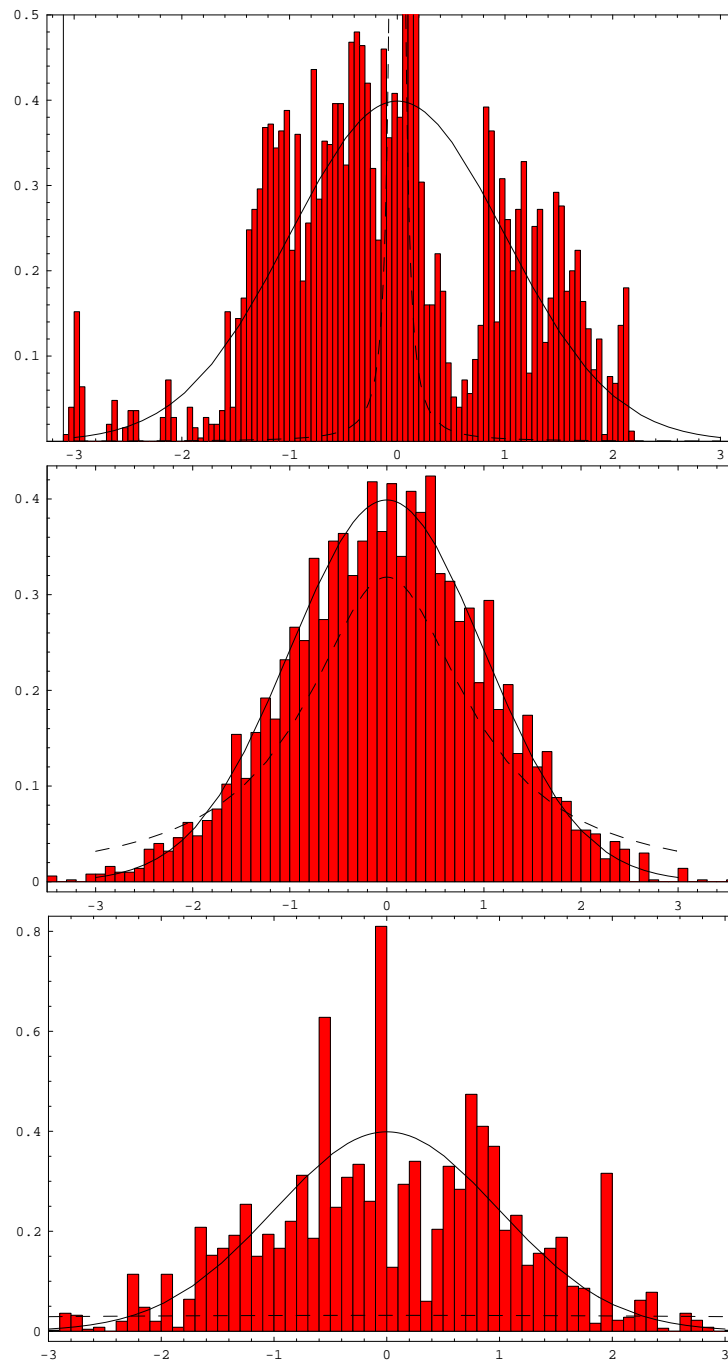


Figure 3.3 : Simulation de $\mathcal{N}(0, 1)$ avec pour loi instrumentale une loi de Cauchy centrée $\mathcal{C}(0, b)$. (a) $b = 0,01$, $b = 1$, et $b = 10$. On a tracé en pointillé la loi de Cauchy. Histogramme des 5000 valeurs.

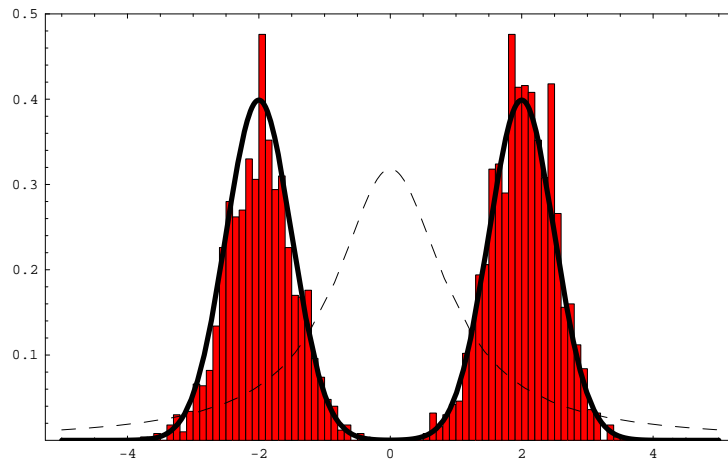


Figure 3.4 : Simulation de $\frac{1}{2}(\mathcal{N}(-2, 0,5) + \mathcal{N}(2, 0,5))$ (courbe en gras) avec pour loi instrumentale une loi de Cauchy centrée $\mathcal{C}(0, 1)$. On a tracé en pointillé la loi de Cauchy.

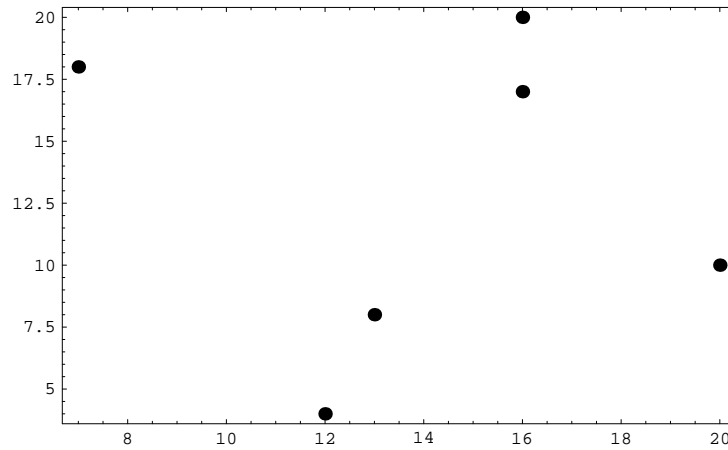


Figure 3.5 : Distribution des 6 villes.

de $\mathcal{N}(0, 1)$ est celui avec un coefficient $b = 1$, pour lequel la loi de Cauchy est également proche de $\mathcal{N}(0, 1)$. On peut simuler des lois plus complexes comme la somme de deux gaussiennes $\mathcal{N}(-2, 0,5)$ et $\mathcal{N}(2, 0,5)$. A partir d'une loi instrumentale $\mathcal{C}(0, 1)$, on parvient à représenter assez correctement la loi ciblée.

3.5.6 Un exemple de minimisation

Un problème classique est la recherche de l'ordre idéal de parcours d'un représentant de commerce qui doit visiter n villes. Dès que n est grand, il y a $n!$ permutations possibles et la recherche de la combinaison qui correspond à la distance totale minimale devient très lourd numériquement. Sur la figure 4, on donne un exemple de distribution de $n = 6$ villes (numérotées de 1 à 6), cela représente déjà $6! = 720$ combinaisons possibles. Dans le cas présent la distance minimale est 31,685.

L'algorithme est le suivant :

1. on part d'une combinaison initiale par exemple $x_0 = 1, 2, 3, 4, 5, 6$;
2. au rang k , on choisit deux nombres aléatoires i et j (avec $i \neq j$) compris entre 1 et n . On effectue une permutation de l'élément i avec j de la suite x_{k-1} ;

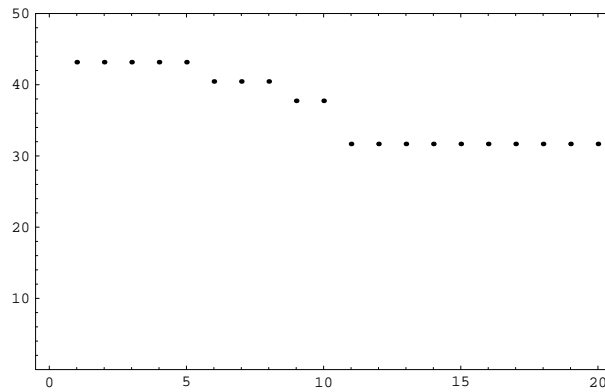


Figure 3.6 : Convergence de d_k .

3. on calcule la distance d_k totale si on parcourt les villes selon cet ordre ;
4. si $d_k < d_{k-1}$, alors x_k est la nouvelle combinaison sinon $x_k x_{k-1}$ avec une probabilité $e^{-\lambda_n(d_k - d_{k-1})}$ (en pratique on génère un nombre aléatoire y : si $y < e^{-\lambda_n(d_k - d_{k-1})}$ on accepte sinon on refuse de changer d'état) ;
5. on retourne à l'étape 2 ;

Sur la figure 5, on a reporté la convergence de d_k ; très rapidement, on arrive (dès $k = 11$) on arrive à trouver la combinaison qui minimise la distance (ici $\{6, 1, 3, 2, 4, 5\}$).

3.6 L'échantillonnage de Gibbs

3.6.1 Philosophie

Quand on veut simuler des lois en dimension 2 ou plus, il arrive que les lois conditionnelles soient plus faciles à simuler que la loi. Par exemple, en dimension 2, on veut simuler une loi $P(x_1, x_2)$:

- on part d'un état $\mathbf{x}^{(t)} = (x_1, x_2)$
- on tire \tilde{x}_1 à partir de la loi $P(x_1|x_2)$ avec x_2 fixé à $x_2^{(t)}$ en utilisant un algorithme de Metropolis
- on tire x_2 à partir de la loi $P(x_2|x_1)$ avec $x_1 = \tilde{x}_1$ trouvé à l'étape précédent
- on définit ainsi $\mathbf{x}^{(t+1)} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ et on itère.

3.6.2 Une autre formulation

Une version très utilisée de l'algorithme de Gibbs est l'échantillonnage de Gibbs. Soit $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ un vecteur aléatoire de densité de probabilité $p(\mathbf{X})$. On veut générer un vecteur aléatoire de densité conditionnelle $f(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|\mathbf{X} \in \mathcal{A})$ où \mathcal{A} est un ensemble donné. Pour cela on considère une chaîne de Markov avec des états $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{A}$ et une matrice de probabilité de transition définie comme suit. Chaque fois que l'état visité est \mathbf{x} , une coordonnée qui a une probabilité uniforme d'être comprise entre 1 et n est générée. Si la coordonnée i est choisie, alors une variable aléatoire X de densité $\text{Prob}(X = x) = \text{Prob}(X_i = x | X_j = x_j, j \neq i)$ est généré. Si $X = x$ alors l'état $\mathbf{y} =$

$(x_1, \dots, x_{i-1}, x, x_{i+1}, \dots, x_n)$ est pris pour la transition. Cela veut dire que l'échantillonnage de Gibbs utilise l'algorithme d'Hastings-Metropolis avec :

$$q(x, y) = \frac{1}{n} \text{Prob}(X_i = x | X_j = x_j, j \neq i) = \frac{1}{n} \frac{p(\mathbf{y})}{\text{Prob}(X_j = x_j, j \neq i)}$$

Le vecteur \mathbf{y} est accepté avec la probabilité :

$$\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \left(\frac{f(\mathbf{y})q(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{f(\mathbf{x})q(\mathbf{x}, \mathbf{y})}, 1 \right)$$

Si $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$ et $\mathbf{y} \in \mathcal{A}$, alors $\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1$ (si $\mathbf{y} \in \mathcal{A}$ le prochain état est \mathbf{y}). Si $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$ et $\mathbf{y} \notin \mathcal{A}$, alors $\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ (le prochain état reste \mathbf{x}).

3.6.3 Recuit simulé ou *simulated annealing*

Principe

Une version appelée *simulated annealing* (recuit simulé) peut être mise en œuvre quand on cherche la valeur maximale d'une fonctionnelle positive $V(\mathbf{x})$ définie sur un espace fini \mathcal{A} . Par analogie avec la physique, à un état i d'un système est associée une énergie $E(i)$. Si p_i est la probabilité que le système soit l'état i , alors l'énergie moyenne du système s'écrit :

$$\mathbb{E}_f[E] = \sum_{i \in \mathcal{A}} E(i)p_i$$

A énergie moyenne constante, la loi qui maximise l'entropie¹ $H = \sum_i p_i \log p_i$ est de la forme $p_i = a \exp[bE(i)]$ avec (a, b) deux constantes. C'est la loi de Boltzmann. On appelle *mesure de Gibbs* associée à la fonction d'énergie E et à la température $T > 0$ la loi de probabilité $p = (p_i)_{i \in \mathcal{A}}$ telle que :

$$p_i = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{E(i)}{T}}$$

Les mesures de Gibbs ont la particularité de se concentrer à basse température sur les états d'énergie minimale :

$$\lim_{T \rightarrow 0} p_i = \frac{1}{|E_{min}|} \mathbf{1}_{E_{min}}(i)$$

avec E_{min} l'énergie minimale.

Une stratégie est donc pour minimiser une fonction E quelconque de la considérer comme une énergie, puis on simule la loi p pour une température suffisamment basse. On doit obtenir à la fin un échantillon de valeurs quasi uniformes qui donne la valeur E_{min} . La constante de normalisation $Z(T)$ est souvent impossible à calculer mais cela n'est pas nécessaire pour simuler une mesure de Gibbs. Le défaut de cette approche est qu'il y a de fortes chances en travaillant d'emblée à basse température que l'on se trouve dans un minimum local. Pour éviter cela, il faut autoriser l'algorithme à effectuer des pas dans la mauvaise direction. On fait en sorte que la température baisse graduellement $T(n) \rightarrow 0$.

1. il faut naturellement que $p_i > 0$. L'entropie est une mesure de l'incertitude, du manque d'information lié à la loi p . Un principe fondamental de la physique fait que l'on choisit comme modèles des lois de probabilité d'entropie maximale. En l'absence de toute information, la loi qui maximise l'entropie est la loi uniforme sur \mathcal{A} ; l'incertitude est maximale. L'entropie est minimale et vaut 0 si un état i est certain; dans ce cas, $p_i = 1$ et $p_k = 0$ pour $k \neq i$.

Application

Notons que l'on minimise ou maximise une fonction.

On pose : $V^* = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{A}} V(\mathbf{x})$ et $\mathcal{M} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{A} : V(\mathbf{x}) = V^*\}$; $|\mathcal{M}|$ désigne le nombre d'éléments dans \mathcal{M} . Pour cela introduisons un entier $\lambda = 1/T > 0$ et une densité de probabilité :

$$p_\lambda(\mathbf{x}) = \frac{e^{\lambda V(\mathbf{x})}}{\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{A}} e^{\lambda V(\mathbf{x})}}$$

soit encore :

$$p_\lambda(\mathbf{x}) = \frac{e^{\lambda(V(\mathbf{x})-V^*)}}{|\mathcal{M}| + \sum_{\mathbf{x} \notin \mathcal{M}} e^{\lambda V(\mathbf{x})}}$$

On note que lorsque $\lambda \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$), alors :

$$p_\lambda(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{\delta(\mathbf{x}, \mathcal{M})}{|\mathcal{M}|}$$

En pratique, on peut utiliser la notion de voisin et utiliser l'algorithme d'Hastings-Metropolis. On suppose qu'il y a équiprobabilité de passer d'un état à un état voisin et que si un voisin \mathbf{y} est choisi alors on affecte au passage $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}$ la probabilité :

$$\min \left(\frac{e^{\lambda V(\mathbf{y})}/|N(\mathbf{y})|}{e^{\lambda V(\mathbf{x})}/|N(\mathbf{x})|}, 1 \right)$$

où $|N(\mathbf{x})|$ est le nombre de voisins de \mathbf{x} . Si ce n'est pas un voisin alors l'état reste \mathbf{x} . Si chaque vecteur a un nombre identique de voisins², alors, partant de \mathbf{x} , un voisin \mathbf{y} est choisi au hasard. Si $V(\mathbf{y}) \geq V(\mathbf{x})$ alors la chaîne prend l'état \mathbf{y} avec une probabilité $e^{\lambda(V(\mathbf{y})-V(\mathbf{x}))}$.

Les faiblesses de cette méthode sont :

- comme λ est grand cela peut prendre beaucoup de temps pour qu'une chaîne change d'état lorsqu'elle entre dans un état \mathbf{x} dont la valeur $V(\mathbf{x})$ est bien plus grande que pour les voisins ;
- comme il y a un nombre fini de valeurs possibles pour \mathbf{x} , la convergence n'est pas garantie.

Pour améliorer cela l'idée est de considérer que λ varie au cours du temps et peut prendre des valeurs croissantes, par exemple : $\lambda_n = C \log(1+n)$ avec $C > 0$. De manière similaire, on peut maintenir la température constante sur des paliers de longueur exponentiellement croissante :

$$\forall k \in \mathbb{N}^*, \forall n \in]e^{(k-1)C}, e^{kC}[, \lambda_n = k$$

2. Cela peut toujours être créé en augmentant l'espace des états et pour tous ces nouveaux éléments en posant $V(\mathbf{x}) = 0$.

Chapitre 4

Processus de Markov à saut avec des états continus ou discrets

4.0.4 Equation de Chapman-Kolomogorov et définitions

Pour un processus $X(t)$, on définit la densité de probabilité d'état par :

$$P(n,t|n_0,t_0) = \text{Prob}\{X(t) = n \text{ sachant que } X(t_0) = n_0\}$$

Cette densité vérifie naturellement les conditions :

$$P(n,t) \geq 0$$

$$\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} P(n,t) = 1$$

$$P(n,t_0|n_0,t_0) = \delta(n - n_0)$$

$$P(n_k,t_k|n_0,t_0; n_1,t_1; \dots; n_{k-1},t_{k-1}) = P(n_k,t_k|n_{k-1},t_{k-1})$$

L'équation de Chapman-Kolomogorov s'écrit pour un processus à saut avec des états discrets :

$$P(n_2,t_2|n_0,t_0) = \sum_{n_1=-\infty}^{n_1=+\infty} P(n_2,t_2|n_1,t_1)P(n_1,t_1|n_0,t_0)$$

Pour des états continus, il faut remplacer l'opérateur de sommation par une intégrale :

$$P(x,t + \tau|x_0,t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P(x,t + \tau|x - \xi,t)P(x - \xi,t|x_0,t_0) \quad (4.1)$$

On appelle *propagateur* du processus la variable aléatoire :

$$\Xi(dt; n,t) = X(t + dt) - X(t) \text{ sachant que } X(t) = n$$

dont la densité de probabilité est :

$$\Pi(\nu|dt; n,t) = \text{Prob}(\Xi(dt; n,t) = \nu) = \text{Prob}(X(n,t) = n + \nu \text{ sachant que } X(t) = n) = P(n + \nu, t + dt|n,t)$$

On introduit des fonctions qui caractérisent le processus :

$$q(n,t; \tau) = \begin{array}{l} \text{probabilité sachant que } X(t) = n, \\ \text{le processus quitte l'état } n \text{ à un instant compris entre} \\ t \text{ et } dt + t \end{array}$$

probabilité sachant que $X(t) = n$,
 $\omega(\nu|n,t) =$ le processus en quittant l'état n à l'instant
 t arrive dans un état $\nu + n$

q et ω sont deux fonctions continues de t (q l'en également de τ). De plus ω est une densité de probabilité, donc vérifie la condition : $\sum_{\nu=-\infty}^{\nu=+\infty} \omega(\nu|n,t) = 1$. Si on peut assimiler τ à un temps infinitésimal, alors on peut écrire que $q(n,t; dt) = a(n,t) dt$. La probabilité que l'état change entre les instants voisins t et $t + dt$ est donc $a dt$ et la probabilité que rien ne change est $(1-a) dt$. La densité de probabilité du propagateur pour un incrément de temps infinitésimal peut donc se déduire : $\Pi(\nu dt; n,t) = a(n,t) dt \omega(\nu|n,t) + (1-a)\delta(\nu)$. A noter que q et a sont reliées puisque si l'on introduit $1 - q_*$ la probabilité que rien ne passe alors : $q_*(n,t; d\tau + \tau) = q_*(n,t; \tau) q_*(n,t + \tau; d\tau)$, soit $d q_*(n,t; \tau) / q_*(n,t; \tau) = -a(n,t + \tau) d\tau$, d'où :

$$q(n,t; \tau) = 1 - \exp \left(- \int_0^\tau a(n,t + \tau') d\tau' \right)$$

On introduit également la *fonction caractéristique consolidée* du processus par :

$$W(\nu|n,t) = a(n,t)\omega(\nu|n,t) \quad (4.2)$$

dont l'interprétation est simple : $W(\nu|n,t) dt$ est la probabilité que le processus, sachant que $X(t) = n$, saute à un état $n + \nu$ entre les instants t et $t + dt$. A noter que la connaissance de W conduit à celle de a et ω puisque l'on a (selon que les états sont continus ou discrets) :

$$a(n,t) = \sum_{\nu=-\infty}^{\nu=+\infty} W(\nu|n,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu W(\nu|n,t)$$

$$\omega(\nu|n,t) = \frac{W(\nu|n,t)}{\sum_{\nu'=-\infty}^{\nu'=+\infty} W(\nu'|n,t)} = \frac{W(\nu|n,t)}{\int_{-\infty}^{+\infty} d\nu' W(\nu'|n,t)}$$

On note $\omega_k(n,t)$ et $W_k(n,t)$ le k -moment de ω et de W : $\omega_k(n,t) = \sum_{\nu=-\infty}^{\nu=+\infty} \nu^k \omega(\nu|n,t)$ et $W_k(n,t) = \sum_{\nu=-\infty}^{\nu=+\infty} \nu^k W(\nu|n,t) = a(n,t)\omega_k(n,t)$.

La dernière fonction introduite est la densité de probabilité du prochain saut : $p(\tau, \nu|n,t) d\tau$ est la probabilité que le processus saute de l'état n à $n + \nu$ entre les instants $t + \tau$ et $t + \tau + d\tau$. A noter que Π est une densité de probabilité qui ne fait que renseigner sur le changement d'état alors que p est la densité jointe qu'il y ait à la fois un saut et un changement d'état $n \rightarrow n + \nu$. Comme on a :

$$p(\tau, \nu|n,t) d\tau = (1 - q(n,t; \tau)) a(n,t + d\tau) \omega(\nu|n,t + \tau)$$

En se servant de l'expression pour q , on tire :

$$p(\tau, \nu|n,t) d\tau = \exp \left(- \int_0^\tau a(n,t + \tau') d\tau' \right) a(n,t + d\tau) \omega(\nu|n,t + \tau)$$

On peut encore décomposer p sous forme de probabilités conditionnelles : $p(\tau, \xi|n,t) = p_1(\tau|n,t) p_2(\xi|\tau; n,t)$ avec :

$$p_1(\tau|n,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' p(\tau, \xi'|n,t) = a(n,t + \tau) \exp \left(- \int_0^\tau a(n,t + \tau') d\tau' \right)$$

$$p_2(\xi|\tau; n,t) = \frac{p(\tau, \xi|n,t)}{\int_{-\infty}^{\infty} d\xi' p(\tau, \xi'|n,t)} = \omega(\xi|n,t + \tau)$$

4.0.5 Equation d'évolution

L'équation maîtresse s'écrit comme :

$$P(x, t + dt | x_0, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P(x, t + dt | x - \xi, t) P(x - \xi, t | x_0, t_0) \quad (4.3)$$

que l'on peut transformer en :

$$P(x, t + dt | x_0, t_0) = (1 - a(x, t) dt) P(x, t | x_0, t_0) + \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi dt a(x - \xi, t) \omega(\xi | x - \xi, t) P(x - \xi, t | x_0, t_0)$$

et après quelques manipulations algébriques, on obtient :

$$\frac{\partial P(x, t | x_0, t_0)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi (W(\xi | x - \xi, t) P(x - \xi, t | x_0, t_0) - W(-\xi | x, t) P(x, t | x_0, t_0))$$

ou bien pour un processus à saut discret :

$$\frac{\partial P(n, t | n_0, t_0)}{\partial t} = \sum_{\nu=-\infty}^{\nu=+\infty} (W(\nu | n - \nu, t) P(n - \nu, t | n_0, t_0) - W(-\nu | n, t) P(n, t | n_0, t_0))$$

On peut en déduire l'équation d'évolution des moments de X (en multipliant $P(x, t)$ par x^n puis en intégrant. On a :

$$\frac{d \langle X^n(t) \rangle}{dt} = \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \langle X^{n-k}(t) W_k(X(t), t) \rangle \quad (4.4)$$

avec pour conditions initiales $\langle X^n(t_0) \rangle = x_0^n$. A noter que cette série d'équations d'évolution des moments est fermée uniquement si $W_k(x, t)$ sont des polynômes de x de degré $i \leq k$ sinon les équations ne sont pas fermées (il faut une infinité d'équations pour déterminer un moment). On obtient pour les premier et second moments :

$$\frac{d \langle X(t) \rangle}{dt} = \langle W_1(X(t), t) \rangle \quad (4.5)$$

$$\frac{d \langle \text{var}[X(t)] \rangle}{dt} = 2 (\langle X(t) W_1(X(t), t) \rangle - \langle X(t) \rangle \langle W_1(X(t), t) \rangle) + \langle W_2(X(t), t) \rangle \quad (4.6)$$

4.0.6 Les processus complètement homogènes

On appelle *processus complètement homogène* un processus indépendant du temps t et de l'état n , soit encore $a(n, t) = a$ et $\omega(\xi | n, t) = \omega(\xi)$. D'où $p(\tau, \xi | n, t) = p(\tau, \xi) = a \exp^{-a\tau} \omega(\xi)$.

4.1 Méthodes de simulation numérique

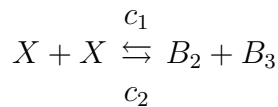
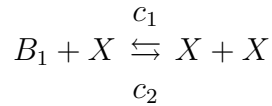
Pour simuler numériquement le processus $X(t)$, on se sert des propriétés de la fonction « densité de probabilité du prochain saut » $p(\tau, \xi | n, t)$. C'est une probabilité jointe mais elle peut être décomposée de façon commode en : $p(\tau, \xi | n, t) = p_1(\tau | n, t) p_2(\xi | \tau, n, t)$. On peut ainsi générer un couple (τ, ξ) à partir de leur densité de probabilité conditionnelle. Ainsi pour un processus homogène :

1. On a $p_1(n) = a(n) \exp^{-a(n)\tau}$. Il suffit de tirer un nombre aléatoire r entre 0 et 1 de densité uniforme et de prendre $\tau = -\ln r / a(n)$;

2. tirer ξ selon la loi conditionnelle $\omega(\xi|n)$ par exemple par la méthode d'inversion ou par la méthode du rejet ;
3. faire avancer le processus $n + \xi \rightarrow n$ et $t + \tau \rightarrow \tau$.

4.1.1 Exemple : cinétique chimique

On étudie le système de réactions couplées :



On admet que les espèces B_1 , B_2 , et B_3 sont en nombre N_i (avec $i = 1, 2$, ou 3) tellement grand que leur concentration ne change pas. On appelle $X(t)$ le nombre de molécules de X à l'instant t . Admettons qu'à l'instant t , on ait $X(t) = n$; alors X augmente de 1 uniquement la réaction $B_1 + X \rightarrow 2X$ a lieu. La probabilité qu'une telle réaction ait lieu entre t et $t + dt$ est également à $c_1 N_1 n dt$. On note donc $W(+1|n, t) = c_1 n N_1$. En refaisant la même chose avec les autres équations on aboutit à :

$$W(\nu|n) = \begin{cases} c_1 n N_1 & \text{si } \nu = +1 \\ c_2 n(n-1)/2 & \text{si } \nu = -1 \\ c_3 n N_1 & \text{si } \nu = -2 \\ c_4 N_2 N_3 & \text{si } \nu = +2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On tire que les moments de W sont :

$$W_k(n) = \sum_{\nu=-\infty}^{\nu=+\infty} \nu^k W(\nu|n) = c_1 n N_1 + (-1)^k c_2 n(n-1)/2 + (-2)^k c_3 n N_1 + 2^k c_4 N_2 N_3$$

La moyenne de X varie donc selon :

$$\frac{d\langle X(t) \rangle}{dt} = \langle W_1(X(t), t) \rangle = c_1 N_1 \langle X(t) \rangle - \frac{c_2}{2} \langle X(t)(X(t) - 1) \rangle - c_3 \langle X(t)(X(t) - 1) \rangle + 2c_4 N_2 N_3$$

C'est une équation qu'il faut fermer pour pouvoir la résoudre.

Chapitre 5

La méthode PDF pour traiter la turbulence

5.0.2 Quelques notions sur la détermination des lois de variation des probabilités du système

Pour commencer, partons d'un système dynamique déterministe de la forme : $\dot{\mathbf{u}} = A(\mathbf{u})$, avec une condition initiale de la forme : $\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$. Nous avons vu que la probabilité d'observer \mathbf{u} est : $p(\mathbf{v} | \mathbf{u}_0, t_0) = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u})$. On a vu précédemment que la loi de variation de p est donnée par l'équation de Liouville. Ce résultat peut se retrouver directement en utilisant les propriétés de la fonction Dirac, notamment le fait que sa dérivée est une fonction impaire : $\delta'(x) = -\delta'(-x)$. Dérivons par rapport au temps p :

$$\frac{dp(\mathbf{v})}{dt} = \frac{d\delta(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{dt} = -\frac{d\mathbf{u}}{dt} \delta'(\mathbf{v} - \mathbf{u}) = -\frac{d\mathbf{u}}{dt} \frac{\delta(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{d\mathbf{v}} = -\frac{dA(\mathbf{u})p(\mathbf{v})}{d\mathbf{v}}$$

Ce résultat peut se généraliser à des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles plutôt que des équations différentielles ordinaires. L'idée par la suite est de manipuler des fonctions Dirac même pour des systèmes qui ne sont plus déterministes. Dans la littérature technique, on emploie le terme de « fine-grained description » du système. Ainsi dans un système avec des variables aléatoire, on introduit la densité de probabilité du champ de vitesse $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ (on notera \mathbf{V} le pendant de \mathbf{U} dans l'espace des probabilités) : $f(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t)$. Il est ensuite assez usuel de définir la moyenne d'une fonction du champ cinématique de la manière suivante :

$$\langle Q(\mathbf{U}; \mathbf{x}, t) \rangle = \int Q(\mathbf{V}) f(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t) d\mathbf{V}$$

On peut définir de la même manière la moyenne conditionnelle d'un champ aléatoire $\phi(\mathbf{x}, t)$ (on note ψ le pendant de ϕ dans l'espace des probabilités). La fonction de distribution de ϕ sachant \mathbf{U} s'écrit : $f_{\phi|\mathbf{U}}(\psi|\mathbf{V}, \mathbf{x}, t) = f_{\phi\mathbf{U}}(\psi, \mathbf{V}; \mathbf{x}, t) / f(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t)$. De là, on tire :

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) | \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{V} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi f_{\phi|\mathbf{U}}(\psi|\mathbf{V}, \mathbf{x}, t) d\psi$$

Introduisons maintenant la probabilité à grain fin (traduction littérale de *fine-grained*) :

$$f'(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{V})$$

Deux propriétés intéressantes quand on passe à la moyenne sont :

$$\langle f'(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t) \rangle = f(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t)$$

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) f'(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t) \rangle = \langle \phi(\mathbf{x}, t) | \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{V} \rangle f(\mathbf{V}; \mathbf{x}, t)$$

Pour un champ cinématique incompressible ($\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$), on montre en employant la même technique que précédemment que la dérivée matérielle de f' est :

$$\frac{df'}{dt} = \partial_t f' + \mathbf{V} \cdot \nabla f' = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \left(f' \frac{d\mathbf{U}}{dt} \right)$$

Et si on prend la moyenne de cette équation on a :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla f = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \left(f \left\langle \frac{d\mathbf{U}}{dt} \mid \mathbf{V} \right\rangle \right) \quad (5.1)$$

A ce niveau, hormis l'hypothèse d'incompressibilité du fluide, il n'y a pas de physique cachée dans cette équation. Cette équation dit simplement que le taux de variation de f est liée à l'accélération du fluide. Si le fluide est newtonien, on a :

$$\frac{df}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \left(f \left\langle \nu \nabla^2 \mathbf{U} - \frac{1}{\rho} \nabla p \mid \mathbf{V} \right\rangle \right) \quad (5.2)$$

La décomposition de Reynolds pour la pression ($p = \langle p \rangle + p'$) donne finalement :

$$\frac{df}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \langle p \rangle \cdot \nabla f - \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \left(f \left\langle \nu \nabla^2 \mathbf{U} - \frac{1}{\rho} \nabla p' \mid \mathbf{V} \right\rangle \right) \quad (5.3)$$

A noter que si l'on se fixe f , on peut calculer le champ cinématique moyen $\langle \mathbf{U} \rangle$ et la distribution de contrainte de Reynolds $\langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle$, donc on connaît $\langle p \rangle$ (car la pression moyenne vérifie l'équation de Poisson suivante: $\nabla^2 \langle p \rangle = -\rho \langle \nabla \mathbf{U} : \nabla \mathbf{U} \rangle$). Enfin, si maintenant on multiplie précédente par une quantité qu'on cherche à moyennner (par exemple \mathbf{U}), on retombe sur des équations de variations moyennées classiques, parce que l'intégrale du terme de divergence (intégration sur l'espace des probabilités) donne zéro.

La même technique de calcul permet d'aboutir à l'équation donnant les variations de la vitesse fluctuante $g(\mathbf{u}; \mathbf{x}, t)$:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + (\langle \mathbf{U} \rangle + \langle \mathbf{u} \rangle) \cdot \nabla g + \nabla \cdot \langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle \cdot \frac{\partial g}{\partial \mathbf{v}} - \mathbf{v} \cdot \nabla \langle \mathbf{U} \rangle^T \frac{\partial g}{\partial \mathbf{v}} = \quad (5.4)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[g \left\langle \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \nabla p' \mid \mathbf{v} \right\rangle \right] = \quad (5.5)$$

$$\nu \nabla^2 g + \nabla \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left[g \left\langle \frac{p'}{\rho} \mid \mathbf{v} \right\rangle \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2} [g(\mathcal{R}^c - \varepsilon^c)] \quad (5.6)$$

où on introduit le tenseur combinant pression et taux de déformation (conditionnel à la valeur de \mathbf{u}):

$$\mathcal{R}^c(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t) = \left\langle \frac{p'}{\rho} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \mid \mathbf{v} \right\rangle$$

et le tenseur de dissipation :

$$\varepsilon^c(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t) = 2\nu \langle \nabla \mathbf{u} \nabla \mathbf{u}^T \mid \mathbf{v} \rangle$$

L'expression des variations de g se simplifie considérablement si la turbulence est homogène :

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \mathbf{v} \cdot \nabla \langle \mathbf{U} \rangle^T \frac{\partial g}{\partial \mathbf{v}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2} [g(\mathcal{R}^c - \varepsilon)]$$

5.0.3 La classe de modèles dits « Langevin généralisé »

Pour une vaste classe de modèles, on ferme l'équation (2.3) en écrivant :

$$f \langle \nu \nabla^2 \mathbf{U} - \frac{1}{\rho} \nabla p' | \mathbf{V} \rangle = f \mathbf{G}(\mathbf{V} - \langle \mathbf{U} \rangle) - \frac{1}{2} C_0 \varepsilon \frac{\partial f}{\partial \mathbf{V}} \quad (5.7)$$

et

$$g(\mathcal{R}^c - \varepsilon^c) = g \mathbf{G} \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2} C_0 \varepsilon \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \quad (5.8)$$

On a la contrainte suivante entre C_0 et \mathbf{G} : $(1 + 3C_0/2)\varepsilon + \mathbf{G} : \langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle = 0$. L'effet du premier terme (avec \mathbf{G} devant) est typiquement celui d'un processus de dérive (*drift*: une densité de probabilité initiale est déformée mais sa forme générale ne change pas. A l'opposé, le second terme (avec ε devant) est de la diffusion, avec pour effet d'adoucir la forme initiale d'une densité de probabilité et la faire tendre vers une gaussienne. On peut ainsi montrer que pour une turbulence homogène, indépendamment des conditions initiales, la densité de probabilité tend vers une gaussienne.

5.0.4 Relation entre une formulation lagrangienne et une formulation eulérienne

On appelle $f_L(\mathbf{V}, \mathbf{x}; t | \mathbf{Y})$ la probabilité d'avoir une particule en \mathbf{x} avec une vitesse \mathbf{V} à l'instant t sachant qu'elle est à l'instant initial en \mathbf{Y} . On a :

$$f_L(\mathbf{V}, \mathbf{x}; t | \mathbf{Y}) = \langle f'_L(\mathbf{V}, \mathbf{x}; t | \mathbf{Y}) \rangle$$

où $f'_L(\mathbf{V}, \mathbf{x}; t | \mathbf{Y}) = \delta(\mathbf{U}^+ - \mathbf{V})\delta(\mathbf{X}^+ - \mathbf{x})$. On montre facilement que :

$$\int f_L(\mathbf{V}, \mathbf{x}; t | \mathbf{Y}) d\mathbf{Y} = f(\mathbf{V}, \mathbf{x}; t)$$

la probabilité eulérienne est l'intégrale de toutes les probabilités lagrangiennes. On montre de même que la densité de probabilité des fluctuations eulérienne s'obtient par intégration de la probabilité lagrangienne avec \mathbf{Y} comme variable d'intégration.

5.0.5 Formulation lagrangienne

Une alternative à l'approche eulérienne décrite précédemment est de considérer une particule (fictive) de fluide et de la suivre. Par exemple, on peut prendre :

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \langle p \rangle + \mathbf{G}(\mathbf{U} - \langle \mathbf{U} \rangle) \quad (5.9)$$

Ce type de modèle n'est pas très satisfaisant car il n'y a pas de relaxation de la densité de probabilité $f(\mathbf{V}; \mathbf{x}; t)$ vers une gaussienne. Il faut pour cela ajouter un terme de diffusion, qui est généralement introduit sous la forme d'un processus de Wiener $dW(t)$. Considérons un modèle très simple de turbulence homogène (vitesse moyenne nulle). Alors un modèle de déplacement de la particule peut être :

$$dU^+ = -U^+ \frac{dt}{T_L} + \left(\frac{2\sigma^2}{T_L} \right)^{1/2} dW(t)$$

T_L est l'échelle de temps de relaxation de la particule tandis que la diffusion ajoute un terme de moyenne zéro et de variance $2\sigma^2 dt/T_L$. On a par ailleurs: $2\sigma^2/T_L = C_0\varepsilon$ et $T_L^{-1} = 3C_0\varepsilon/(4k)$. L'équation de Fokker-Planck associée est :

$$\frac{\partial f_L}{\partial t} = \frac{1}{T_L} \frac{\partial V f_L}{\partial V} + \frac{\sigma^2}{T_L} \frac{\partial^2 f_L}{\partial V^2}$$

On montre alors que U^+ est un processus de Markov, gaussien, de valeur moyenne nulle, de variance σ^2 , et de fonction d'autocorrélation $\rho(s) = e^{-|s|/T_L}$. Cette formulation peut facilement être étendue pour de la turbulence hétérogène.