

Méthodes de Monte-Carlo

Annie MILLET*

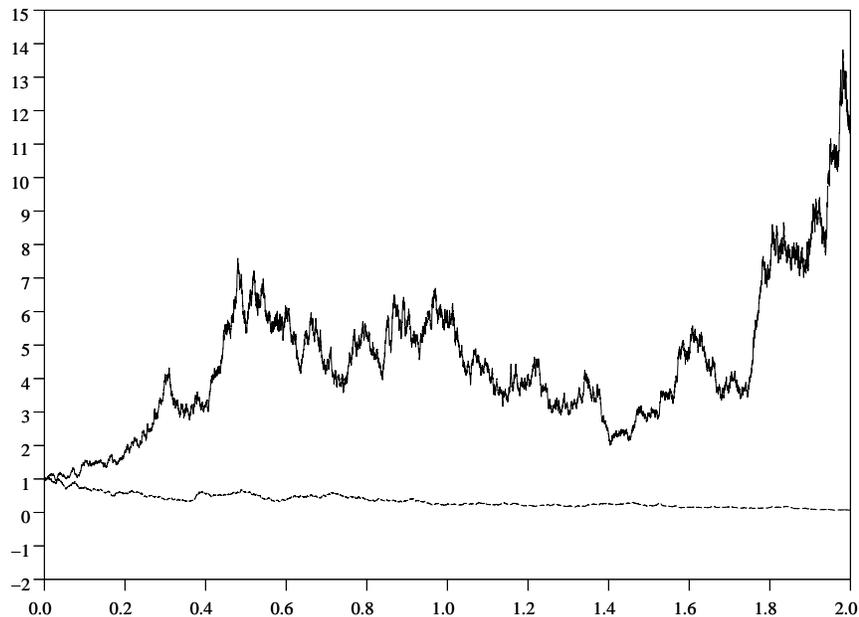
Universités Paris 7 et Paris 1

Master 2 ème année : Spécialité Modélisation Aléatoire

Recherche et Professionnel

Parcours : Statistique et Modèles Aléatoires en Finance

Parcours : Probabilités, Statistique et Applications :
Signal, Image, Réseaux



* *Laboratoire de Probabilités et Modèles Aléatoires, Universités Paris 6 et Paris 7,
175 rue du Chevaleret 75013 Paris France et
SAMOS-MATISSE, Université Paris 1, 90 Rue de Tolbiac, 75634 Paris Cedex 13 France
e-mail : amil@ccr.jussieu.fr et amillet@univ-paris1.fr*

Table des matières

1	Générateurs de nombres pseudo-aléatoires et suites à discrédance faible	4
1.1	Introduction	4
1.2	Quelques générateurs fournis par les systèmes	6
1.3	Générateurs portables	7
1.4	Suites à discrédance faible	10
2	Simulation de variables aléatoires.	16
2.1	Méthode d'inversion	16
2.2	Méthode de rejet pour les lois uniformes	18
2.3	Méthode de rejet générale	19
2.4	Lois gaussiennes réelles	22
2.5	Vecteurs gaussiens	25
2.6	Quelques autres lois classiques	27
2.7	Méthode de décomposition	28
2.8	Simulation de vecteurs aléatoires	29
2.9	Méthode de mélange	29
2.10	Exercices	30
3	Simulation de processus	36
3.1	Mouvement Brownien	36
3.2	Intégrales stochastiques et diffusions	44
3.3	Schéma d'Euler	46
3.4	Schéma de Milstein	51
3.5	Processus de Poisson.	54
3.6	Chaînes de Markov	56
3.7	Exercices	61
4	Équation de Feynman-Kac et convergence faible des schémas de discrétisation	64
4.1	Générateur infinitésimal.	64
4.2	Équation de Feynman-Kac, problèmes de Cauchy et de Dirichlet.	66
4.3	Convergence faible du schéma d'Euler	76
4.4	Exercices.	79
5	Méthode de Monte Carlo	82
5.1	Introduction	82
5.2	Réduction de la variance.	85
5.2.1	Échantillonnage préférentiel	85
5.2.2	Variables de contrôle	87
5.2.3	Variables antithétiques.	88
5.2.4	Méthode de stratification	90
5.2.5	Valeur moyenne ou conditionnement	91
5.3	Exercices	91
6	Méthode de Monte Carlo et chaînes de Markov.	96
6.1	Mesures invariantes et Théorème ergodique.	96
6.2	Simulation exacte d'une probabilité stationnaire	102
6.3	Probabilités réversibles.	104

6.4	Algorithme de Hastings-Metropolis.	106
6.5	Algorithme du recuit simulé.	111
6.6	Exercices	120

1 Générateurs de nombres pseudo-aléatoires et suites à discrédance faible

1.1 Introduction

Toute simulation de Monte Carlo fait intervenir des nombres au hasard et il est donc crucial de répondre à deux questions :

- (1) Comment générer une suite de nombres $(x_n, n \geq 1)$ qui soit la réalisation $(X_n(\omega), n \geq 1)$ d'une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi donnée ?
- (2) Si une telle suite de nombres nous est donnée, comment décider si c'est une réalisation acceptable de la loi demandée ?

Nous verrons que d'un point de vue théorique, la réponse à ces deux questions se ramène au cas de la loi $\mathcal{U}([0, 1])$ uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$; c'est ce qu'on appelle des nombres pseudo-aléatoires. Pour la seconde question, la réponse est que la suite doit passer un certain nombre de tests statistiques d'adéquation à la loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ et d'indépendance. Rappelons deux tests classiques d'adéquation sur la suite (U_1, \dots, U_n) de variables aléatoires simulées.

Pour utiliser le test du χ^2 (qui permet de tester l'adéquation à une loi sur un ensemble fini à p éléments), décomposons l'intervalle $[0, 1]$ en p intervalles $[(k-1)/p, k/p[$ pour $1 \leq k \leq p$ et notons $N_k(\omega)$ le nombre d'indices i tels que $U_i(\omega) \in [(k-1)/p, k/p[$,

$$Z_n = \sum_{k=1}^p \frac{(N_k - n/p)^2}{n/p}.$$

Lorsque la suite $(U_i, i \geq 1)$ est indépendante de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, la suite $(Z_n, n \geq 1)$ converge en loi vers un χ^2 à $p-1$ degrés de liberté. Par contre, quand la suite $(U_i, i \geq 1)$ est indépendante de même loi différente de $\mathcal{U}([0, 1])$, ou tout au moins telle que la probabilité $P(U_1 \in [(k-1)/p, k/p[) \neq \frac{1}{p}$ pour au moins une valeur de $k \in \{1, \dots, p\}$, alors Z_n converge presque sûrement vers $+\infty$. Pratiquement, on choisit donc une valeur a telle que $P(\chi^2(p-1) \leq a) \leq 0.95$ et si $(u_i, 1 \leq i \leq n)$ désigne les valeurs observées de la simulation des U_i et n_k désigne le nombre des valeurs u_i pour $1 \leq i \leq n$ qui tombent dans l'intervalle $[(k-1)/p, k/p[$, lorsque $\sum_{k=1}^p \frac{(n_k - n/p)^2}{n/p} > a$ on rejette l'hypothèse : (U_1, \dots, U_n) est un n -échantillon de loi $\mathcal{U}([0, 1])$. La fonction de répartition d'un χ^2 à ν degrés de liberté est tabulée pour des valeurs de ν inférieures ou égales à 30. Si $30 < \nu < 100$ et si Z est un χ^2 à ν degrés de liberté, la loi de $\sqrt{2Z} - \sqrt{2\nu - 1}$ est proche de celle d'une gaussienne centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$ et finalement, si $\nu \geq 100$ d'après le théorème de la limite centrale, la loi de $\frac{Z - \nu}{\sqrt{2\nu}}$ est proche de celle d'une gaussienne centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$. Lorsque $\nu > 30$, les quartiles sont approximés à partir des valeurs tabulées de la fonction de répartition d'une gaussienne centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$. Une variante du test précédent, basée sur la convergence vers le χ^2 , permet également de tester si la loi d'un n -upplet de vecteurs $((U_1^k, \dots, U_r^k) \in \mathbb{R}^r : 1 \leq k \leq n)$ est de loi $\mathcal{U}([0, 1]^r)$.

Le test de Kolmogorov-Smirnov compare la fonction de répartition empirique

$$F_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{\{U_i \leq t\}}, \quad \forall t \in [0, 1]$$

à la fonction de répartition de la loi uniforme $F(t) = P(U \leq t) = t, \quad \forall t \in [0, 1]$. La suite $S_n = \sqrt{n} \sup\{|F_n(t) - t| : t \in [0, 1]\}$ converge en loi vers S dont la fonction de répartition

$P(S \leq t) = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} e^{-2k^2 t^2}$ pour $t \in]0, 1]$ est tabulée si $(U_i, i \geq 1)$ est un échantillon de loi $\mathcal{U}([0, 1])$ (en fait ce test d'adéquation est valable dans une situation beaucoup plus générale et la fonction de répartition de $\sqrt{n} S_n$ est correctement approchée par celle de S si $n \geq 100$). De nouveau on choisit une valeur de a telle que $P(S \leq a) \leq 1 - \alpha$ (par exemple $a = 1,36$ si $\alpha = 0.05$) et si $\sup_t |\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{\{u_i \leq t\}} - t| > \frac{\alpha}{\sqrt{n}}$ on rejette l'hypothèse : (U_1, \dots, U_n) est un n -échantillon de loi $\mathcal{U}([0, 1])$.

La réponse à la première question a donné lieu à une très abondante littérature. Les procédures qui permettent d'obtenir de telles suites de nombres sont totalement déterministes et plus ou moins sophistiquées. Voici la liste des qualités que devrait avoir un algorithme de génération de nombres pseudo-aléatoires définies par Brent [2].

- *Uniformité* La suite doit passer avec succès les tests d'uniformité et d'indépendance précédents. Si de nombreux générateurs utilisés dans le passé avaient de très mauvaises propriétés statistiques, on dispose actuellement de générateurs qui passent convenablement ces tests.

- *Indépendance* La suite $(u_n, n \geq 1)$ et aussi des sous-suites du type $(u_{nd}, n \geq 1)$ doivent être indépendantes au moins pour de « petites » valeurs de d , telles que $d \leq 6$.

- *Période* La plupart des générateurs utilisés sont des suites périodiques et les programmes font facilement appel à de 10^n valeurs de la suite avec n de l'ordre de 30 ou plus. Ceci impose d'avoir un générateur ayant une très longue période.

- *Reproductibilité* Pour tester un programme, il faut pouvoir reproduire exactement la suite de nombres $(x_n, n \geq 1)$ générée.

- *Portabilité* Il faut pouvoir faire exécuter le programme sur des machines différentes et que les suites fournies par des ordinateurs avec une architecture de 32 bits ou de 64 bits soient identiques si elles ont la même valeur initiale.

- *Sous-suites disjointes* Si une simulation est effectuée sur une machine multiprocesseurs ou si le calcul est distribué à travers un réseau, il faut que les sous-suites utilisées par chaque sous-tâche du programme soient indépendantes.

- *Efficacité* L'appel au générateur étant fait un très grand nombre de fois, il faut que son programme soit le plus simple possible et nécessite peu d'opérations qui doivent être peu coûteuses en temps de calcul.

Il est impossible de présenter dans ces notes tous les générateurs de nombres pseudo-aléatoires utilisés. Les sections suivantes en présentent quelques uns fournis par les systèmes ou portatifs. La plupart des générateurs sont de type « congruenciel », c'est à dire qu'ils fournissent une suite d'entiers $(x_n, n \geq 0)$ donnés par la relation de récurrence :

$$x_{n+1} = a x_n + c \pmod{m};$$

la valeur initiale x_0 est appelée racine, a est le multiplicateur, c est l'accroissement et m le module de la suite. La suite (x_n) prend ses valeurs entre 0 et $m - 1$ et la suite $(x_n/m, n \geq 1)$ prend ses valeurs dans l'intervalle $[0, 1[$. La période maximale d'un tel générateur est m et le théorème suivant donne des conditions nécessaires et suffisantes pour que la période soit m .

Théorème 1.1 *La suite $x_{n+1} = a x_n + c \pmod{m}$ a une période égale à m si et seulement si :*

- 1) *les entiers c et m sont premiers entre eux.*
- 2) *Pour tout facteur premier p de m , $a - 1$ est un multiple de p et si m est un multiple de 4, alors $a - 1$ est un multiple de 4.*

Il peut être techniquement intéressant d'interdire les valeurs 0 et 1, c'est à dire de simuler des réalisations de la loi uniforme sur l'intervalle $]0, 1[$; il suffit alors de rejeter les valeurs trop proches de 0 ou de 1.

Les générateurs les plus utilisés correspondent à un accroissement $c = 0$ et sont donc du type

$$x_{n+1} = a x_n \pmod{m}.$$

Le théorème suivant donne des conditions nécessaires et suffisantes de maximisation de la période si le module est un nombre premier.

Théorème 1.2 *La période de la suite $x_{n+1} = a x_n \pmod{m}$ avec un entier m premier est un diviseur de $m - 1$. Elle est égale à $m - 1$ si et seulement si a est une racine primitive de $m - 1$, c'est à dire si $a \neq 0$ et pour tout facteur premier p de $m - 1$, $a^{\frac{m-1}{p}} \not\equiv 1 \pmod{m}$. Si a est une racine primitive de $m - 1$ et si les entiers k et $m - 1$ sont premiers entre eux, $a^k \pmod{m}$ est également une racine primitive de $m - 1$.*

L'exemple « Minimal Standard » d'une telle suite correspond à $m = 2^{31} - 1$ qui est un nombre de Mersenne premier et $a = 7^5 = 16\,807$ qui est une racine primitive de $m - 1$; sa période est donc $2^{31} - 2 = 2\,147\,483\,646$ de l'ordre de $2,1 \times 10^9$.

1.2 Quelques générateurs fournis par les systèmes

Tout d'abord une mise en garde; la plupart d'entre eux ont de très mauvaises propriétés statistiques. Si certains appartiennent au passé, d'autres sévissent toujours et avant de les utiliser il faut les tester et regarder leur source.

- Le générateur RANDU de la Scientific Subroutine Package (SSP) d'IBM donne un exemple « historique » de générateur de petite période 2^{29} ayant de très mauvaises propriétés statistiques : les triplets de tirages successifs n'appartiennent qu'à 15 plans. La suite fournie par ce générateur est $x_{n+1} = 65\,539 x_n \pmod{2^{31}}$. Pour que sa période soit maximale (égale à 2^{29} il faut que la racine soit un nombre premier.

- La fonction Random en PASCAL ISO, utilisé par le logiciel SAS fait appel au générateur $x_{n+1} = 16\,807 * x_n \pmod{2^{31}}$. Le fait que m soit une puissance de 2 et que $a = 16\,807 = 5^7$ soit tel que $a \pmod{8} = 7 \notin \{3, 5\}$ entraîne que sa période est strictement inférieure à 2^{29} , donc strictement inférieure à celle du précédent. Il a lui aussi de mauvaises propriétés statistiques que SAS a tenté de corriger par une fonction de « battage » .

- Le générateur rand écrit par les auteurs du système UNIX est $x_{n+1} = 1\,103\,515\,245 x_n + 12\,345 \pmod{2^{32}}$ et a également un mauvais comportement statistique (signalé par le constructeur).

- Comme tous les langages de programmation, ANSI C contient un générateur de nombres pseudo-aléatoires drand48 qui est le générateur « Minimal Standard »

$$x_{n+1} = 16\,807 * x_n \pmod{2^{31} - 1}.$$

Les routines suivantes initialisent puis gènèrent une telle suite de nombres ;

```
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
double drand48() ;
intmain(){
    drand48();
    printf("%lf\n" drand48());
    return(0);
}
```

Dans ce programme, `drand48()` produira des nombres réels compris entre 0 et 1. Par défaut, l'amorce initiale `seed` vaut 1 et, sans instruction complémentaire, la suite de nombres obtenue par des appels successifs à `drand48()` sera toujours la même et pourra commencer par 0 suivant les compilateurs ; le premier appel « se débarrasse de 0 » et l'appel suivant est affiché à l'écran après la compilation. L'amorce peut être changée par l'instruction `srand48(seed)` avant les appels à `drand(48)` en précisant la valeur de l'entier `seed`. Nous verrons dans la section suivante comment éventuellement implémenter ce générateur qui, s'il n'est pas totalement satisfaisant, est « moins mauvais » que les précédents.

Pratiquement, si cette méthode de congruence est rapide et nécessite peu de calculs, ce générateur « n'est pas très bon » pour plusieurs raisons qui varient d'une machine à l'autre : la période m n'est pas assez grande et les termes successifs sont trop fortement corrélés. Même dans le cas où la période est de l'ordre de 2^{32} , le nombre de plans contenant des triplets peut n'être que de l'ordre de 1600.

1.3 Générateurs portables

Diverses procédures permettant d'améliorer la simulation d'une loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$. L'une d'entre elles consiste à programmer des générateurs « portables » qui ont passé les tests statistiques et ont une grande période. Nous présenterons trois de ces générateurs, appelés `ran0`, `ran1` et `ran2` et tirés de Numerical Recipies in C [20]. Les codes C correspondants peuvent être télé-chargés à l'adresse Web suivante : <http://sources.redhat.com/gsl/> Signalons enfin le site <http://random.mat.sbg.ac.at/links/> entièrement consacré à la simulation.

Le générateur `ran0` est le « Minimal Standard » est utilisé par la commande C `drand48()` ; il remonte à Lewis, Goldman et Miller (1969) puis a été repris par Park et Miller (1988). Il utilise la suite récurrente $x_{j+1} = a * x_j \pmod{m}$ avec $a = 7^5 = 16\,807$ et $m = 2^{31} - 1 = 2\,147\,483\,647$. Il faut bien sûr ne pas initialiser avec $x_0 = 0$, et l'algorithme suivant de Schrage permet de calculer les termes successifs de la suite sans dépasser les capacités de la machine. On fait la division euclidienne de m par a , soit

$$m = aq + r, \quad \text{avec } 0 \leq r = m \pmod{a} < a.$$

On obtient $q = 127\,773$ et $r = 2\,386 < q$. On vérifie alors aisément que pour tout entier $x \in \{1, \dots, m-1\}$, $a * (x \pmod{q})$ est un entier compris entre 0 et $m-1$ et que $r * \left\lfloor \frac{x}{q} \right\rfloor$ est un entier compris entre 0 et $m-1$; de plus :

$$(a * x) \pmod{m} = \begin{cases} a * (x \pmod{q}) - r * \left\lfloor \frac{x}{q} \right\rfloor & \text{si c'est positif ou nul,} \\ a * (x \pmod{q}) - r * \left\lfloor \frac{x}{q} \right\rfloor + m & \text{sinon.} \end{cases}$$

Enfin, comme m est premier et $a < m$, $x_j \neq 0$ entraîne $x_{j+1} \neq 0$. On calcule $1/m$ en début de programme et la suite $x_i * (1/m)$ prend alors des valeurs strictement comprises entre 0 et 1, ce qui sera utile pour la suite. En initialisant ni avec 0 ni avec la valeur 123 459 876 on obtient un générateur « assez satisfaisant », dont la période est $2^{31} - 2 \sim 2.1 \times 10^9$ d'après le Théorème 1.2, mais qui présente entre autres le défaut suivant : si une des valeurs est inférieure à 10^{-6} , la valeur suivante est inférieure à $1,68 \cdot 10^{-2}$. Cet algorithme présente donc un défaut de corrélation entre les tirages successifs, même assez loin de la période de la suite.

Le défaut de corrélation précédent pour des tirages consécutifs peut être corrigé en choisissant « au hasard », c'est à dire à l'aide d'autres appels au générateur pour choisir d , le nombre x_k avec $k = j + d$ situé d places après j dans la suite, puis en retournant comme tirage uniforme après x_j la valeur x_k . Dans le générateur **ran1** l'algorithme de Park et Miller est mélangé avec une "shuffling-box" de 32 éléments de Bayes-Durham; on suppose de nouveau que $m = 2\,147\,483\,647 = 2^{31} - 1$, $a = 16\,807$, $q = 127\,773$ et $r = 2\,836$. On note $N = 32$ le nombre de termes stockés pour l'étape de sélection aléatoire et $D = 1 + \lfloor \frac{m-1}{N} \rfloor$; alors pour tout $n \in \{0, \dots, m-1\}$, $\lfloor \frac{n}{D} \rfloor \in \{0, \dots, N-1\}$. L'algorithme comporte trois étapes :

Étape d'initialisation du tirage

On interdit 0 comme germe x_0 puis on produit successivement 8 valeurs de la suite $x_{j+1} = a * x_j \pmod{m}$ par une boucle critique qui est celle de **ran0** :

```

h ← ⌊  $\frac{x}{q}$  ⌋
t ← a * (x - h * q) - h * r
Si (t < 0)
    faire x ← t + m
    Sinon x ← t
Fin

```

Ces valeurs seront « jetées » et on produit ensuite par la même boucle critique N valeurs de la suite $x_{j+1} = a * x_j \pmod{m}$ qui sont stockées dans le tableau $S[j]$ de $j = 31$ à $j = 0$. On stocke aussi dans n la dernière valeur prise par la suite récurrente (et déjà stockée dans $S[0]$).

Étape de production des tirages uniformes

On calcule le terme suivant de la suite $x_{j+1} = a * x_j \pmod{m}$ par la boucle critique précédente et on le stocke dans x , puis on calcule $j = \lfloor \frac{n}{D} \rfloor \in \{0, \dots, N-1\}$, on prend le terme $S[j]$ qui est stocké dans n alors que x est stocké dans $S[j]$.

On calcule enfin $u = \frac{n}{m+1}$ qui est la valeur retournée à la fin de cette étape. On peut éventuellement remplacer les valeurs trop près de 0 ou de 1 par $(u \vee \varepsilon) \wedge (1 - \varepsilon)$ à l'aide d'un seuil ε de l'ordre de 10^{-7} pour simuler une loi uniforme sur $]0, 1[$.

Si on peut se contenter d'une « petite » période, ce générateur est satisfaisant car il donne de bons résultats quand on lui applique les test statistiques d'indépendance et d'équidistribution des tirages consécutifs, sauf quand on s'approche trop de la période de la suite en faisant plus de 10^8 tirages. On peut alors utiliser d'autres générateurs qui ont une plus longue période et sont satisfaisants d'un point de vue statistique.

Le générateur **ran2** de L'Écuyer utilise deux générateurs congruenciels : $m_1 = 2\,147\,483\,563$, $a_1 = 40\,014$, $q_1 = 53\,668$ et $r_1 = 12\,211$ pour le premier, $m_2 = 2\,147\,483\,399$, $a_2 = 40\,692$, $q_2 = 52\,774$ et $r_2 = 3\,791$ pour le second. On vérifie que la racine n_0 n'est pas nulle; sinon on la remplace par 1 et on stocke la racine dans y . On prend de nouveau un tableau $S[j]$,

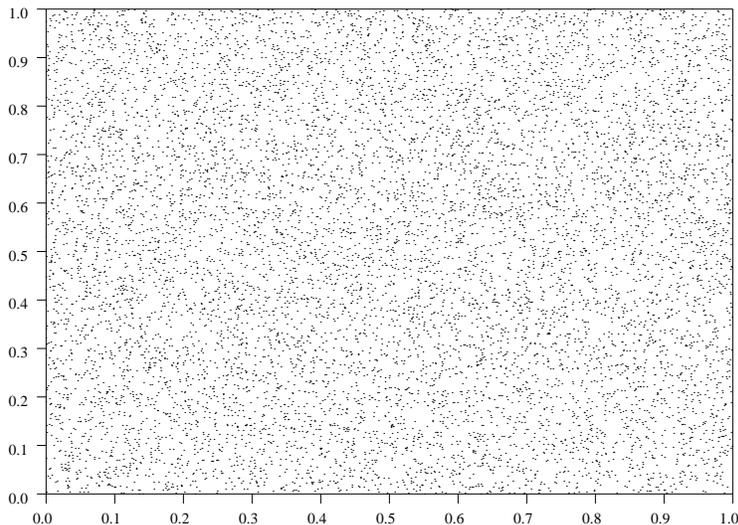
$j = 0, \dots, N - 1$ avec $N = 32$ et on pose $D = 1 + \lfloor \frac{m_1 - 1}{N} \rfloor$. On procède comme dans `ran1` pour l'initialisation de S avec $m = m_1$ et on stocke le dernier entier obtenu dans x et n

Dans l'étape de tirage, en utilisant respectivement q_1, r_1 et q_2, r_2 , on calcule $a_1 * x \pmod{m_1}$ et $a_2 * y \pmod{m_2}$ qui sont stockées dans x et y respectivement. Si n est le tirage uniforme sur $\{0, \dots, m_1 - 1\}$ précédent, on calcule alors $j = \lfloor \frac{n}{D} \rfloor$ et on pose $n = S[j] - y$ si ce nombre est strictement positif et $n = S[j] - y + m_1$ sinon, puis on stocke x dans $S[j]$.

Il reste enfin à diviser n par m_1 et éventuellement interdire les valeurs trop proches de 0 ou de 1. Comme le PGCD de m_1 et m_2 et 2, la période combinée des deux suites (sans tenir compte de la sélection aléatoire) est de l'ordre de $2^{60} \sim 2,3 \times 10^{18}$ et `ran2` a de bonnes propriétés statistiques.

La figure suivante montre la simulation de points uniformément répartis dans le carré $[0, 1]^2$ à l'aide de la simulation de 10 000 tirages de deux variables aléatoires indépendantes de loi $\mathcal{U}([0, 1])$ obtenues par le générateur de Scilab qui est une version de `ran2` de P. L'Ecuyer et S Côté (1991); sa période est $2,3 \times 10^{18}$.

FIG. 1 – Simulation de 10 000 points de loi uniforme sur le carré unité



Il est impossible de présenter tous les générateurs de nombres pseudo-aléatoires corrects existants. On pourra se reporter à [15] pour une grande variété de tels générateurs. Certains sont implémentés dans la bibliothèque de programmes C de GNU gsl (les codes sont inclus si on ne veut pas utiliser les bibliothèques correspondantes) et parmi les « bons générateurs », ils signalent que les plus rapides sont les suivants : `gsl_rng_19937` de Makato Matsumoto et Takuji Nishimura (1998), aussi appelé Mersenne Twister, a une période de 10^{6000} , `gsl_rng_taus2` de P. L'Ecuyer (1999) est très bien équilibré avec une période de 10^{26} . Le générateur par défaut de la bibliothèque `ranlib` disponible sur internet l'adresse suivante : <http://www.netlib.org/cgi-bin/search.pl> est de P. L'Ecuyer et S Côté (1991); sa période est de $2,3 \times 10^{18}$. **Nous ne saurions trop insister sur le fait qu'avant d'utiliser un quelconque de ces programmes disponibles sur internet, il faut impérativement le tester soi même.**

Une dernière remarque : par défaut quel que soit le générateur, la suite des nombres retournés sera toujours la même puisqu'elle aura toujours la même racine; ce peut être utile dans une phase de mise au point d'un programme, mais nuisible dans d'autres conditions. Il est possible de rentrer à la main une racine que l'on choisit et de terminer le programme en faisant stocker l'état du système qui réinitialisera la racine dans l'exécution suivante. Une telle procédure est disponible par exemple dans des routines de gsl, de netlib ou de Scilab. Une autre procédure consiste à utiliser un générateur minimal standard initialisé avec l'horloge afin de générer une racine différente à chaque simulation, sans risque d'atteindre la période.

1.4 Suites à discrédance faible

Nous avons utilisé les générateurs de nombres pseudo aléatoires pour calculer entre autres des intégrales par la méthode de Monte Carlo. Une autre façon de procéder consiste à renoncer au caractère « aléatoire » des tirages et de tirer des points de façon « plus ordonnée ». On parle alors de méthode de quasi-Monte Carlo qui utilise des suites à discrédance faible. Dans un programme, l'appel à la fonction `Random` qui donne le terme suivant d'une suite récurrente prenant ses valeurs entre 0 et 1 doit être remplacé par l'appel au terme suivant de la suite à discrédance faible. Dans ce paragraphe, on pourra se reporter à [1] ou [19] pour les démonstrations omises dans les notes.

La définition suivante formalise la notion de suite équirépartie. Pour tout $a = (a_1, \dots, a_d) \in [0, 1]^d$, et $b = (b_1, \dots, b_d) \in [0, 1]^d$ on note $a \leq b$ si $a_i \leq b_i$ pour tout $i = 1, \dots, d$ et $[a, b] = \{x \in [0, 1]^d : a \leq x \leq b\}$; on note enfin 0 (resp. 1) le vecteur de \mathbb{R}^d dont toutes les composantes sont nulles (resp. égales à 1).

Définition 1.3 Une suite $(x_n)_{n \geq 1}$ est équirépartie dans $[0, 1]^d$ si pour tout $a = (a_1, \dots, a_d) \in [0, 1]^d$,

$$\lim_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n 1_{\{x_k \in [0, a]\}} = \prod_{i=1}^d a_i = \Pi(a).$$

La discrédance de la suite $(x_n, n \geq 1)$ est

$$D_n^*(x) = \sup_{a \in [0, 1]^d} \left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n 1_{\{x_k \in [0, a]\}} - \Pi(a) \right|.$$

Pour tout entier $n \geq 1$, $F_n(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n 1_{\{x_k \in [0, a]\}}$ est la fonction de répartition de la probabilité empirique $\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \delta_{x_n}$ calculée au point a . Afin de montrer que la discrédance d'une suite équirépartie converge vers 0, nous établissons le lemme suivant qui donne des conditions suffisantes pour qu'une suite F_n de fonctions de répartition converge uniformément vers Π .

Lemme 1.4 Soit $(\mu_n, n \geq 1)$ une suite de probabilités sur la tribu des boréliens de $[0, 1]^d$ et $(F_n, n \geq 1)$ la suite des fonctions de répartition des μ_n telle que $F_n \rightarrow \Pi$ dans $L^1([0, 1]^d, \lambda)$ où λ désigne la mesure de Lebesgue. Alors la suite F_n converge uniformément vers Π .

Démonstration : Soit μ une probabilité sur la tribu des boréliens de $[0, 1]^d$ et F sa fonction de répartition. Soit $a \in]0, \frac{1}{2}[$ et $A = [a, 1 - a]^d$.

S'il existe $b > 0$ et $x_0 \in A$ tels que $F(x_0) \leq \Pi(x_0) - b$; alors pour $x \leq x_0$, $F(x) \leq \Pi(x_0) - b$ et

$$\int |F(x) - \Pi(x)| dx \geq \int_{[0, x_0]} \left(\Pi(x) - (\Pi(x_0) - b) \right)^+ dx.$$

De même, s'il existe $x_0 \in A$ tel que $F(x_0) \geq \Pi(x_0) + b$ avec $b > 0$, alors pour $x_0 \leq x \leq 1$, $F(x) \geq \Pi(x_0) + b$ et :

$$\int |F(x) - \Pi(x)| dx \geq \int_{[x_0, 1]} \left(\Pi(x_0) + b - \Pi(x) \right)^+ dx.$$

On déduit que si $\sup\{|F(x) - \Pi(x)| : x \in A\} \geq b > 0$, il existe une constante $C(a, b) \geq \frac{b}{2} [a \wedge b^d 2^{-d(d+1)}] > 0$ telle que $\int |F(x) - \Pi(x)| dx \geq C(a, b)$, c'est à dire que :

$$\int |F(x) - \Pi(x)| dx < C(a, b) \quad \text{entraîne que} \quad \sup\{|F(x) - \Pi(x)| : x \in A\} \leq b.$$

On suppose que $\sup\{|F(x) - \Pi(x)| : x \in A\} \leq \varepsilon$. Si $x \in [0, 1]^d$ est tel qu'il existe $i = 1, \dots, d$ avec $x_i < a$, alors

$$|F(x) - \Pi(x)| \leq F(x) + \Pi(x) \leq \mu(A^c) + \lambda(A^c).$$

Sinon, soit $y = (x_i \wedge (1 - a), 1 \leq i \leq d) \in A$; alors :

$$|F(x) - \Pi(x)| \leq |F(y) - \Pi(y)| + |\Pi(x) - \Pi(y)| + |F(x) - F(y)| \leq \varepsilon + \lambda(A^c) + \mu(A^c).$$

Clairement, $\lambda(A) = (1 - 2a)^d$ et en décomposant $[0, 1 - a]^d \setminus A$ en d pavés (non disjoints) dont les points extrémaux qui ne sont pas situés sur les faces $\{x_i = 0\}$ appartiennent à A , on déduit :

$$\begin{aligned} \mu(A) &= \mu([0, 1 - a]^d) - \mu([0, 1 - a]^d \setminus A) \\ &\geq \Pi([0, 1 - a]^d) - \varepsilon - d \left[a(1 - a)^{d-1} + \varepsilon \right], \end{aligned}$$

ce qui entraîne que

$$\sup_{x \in [0, 1]^d} |F(x) - \Pi(x)| \leq (2 + d) \varepsilon + \left[1 - (1 - 2a)^d \right] + \left[1 - (1 - a)^d \right] + da(1 - a)^{d-1}.$$

Pour tout $\alpha > 0$, il suffit alors de choisir $a > 0$ tel que $1 - (1 - 2a)^d + [1 - (1 - a)^d] + da(1 - a)^{d-1} \leq \alpha$, puis $\varepsilon > 0$ tel que $(2 + d) \varepsilon \leq \alpha$. Puisque $\lim_n \int |F_n(x) - \Pi(x)| dx = 0$, pour n assez grand $\sup\{|F_n(x) - \Pi(x)| : x \in A\} \leq \varepsilon$, ce qui entraîne $\sup\{|F(x) - \Pi(x)| : x \in A\} \leq 2\alpha$. \square

Soit $(U_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi uniforme sur $[0, 1]^d$ et $(F_n, n \geq 1)$ la suite des fonctions de répartition empiriques associée définies par

$$F_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{[0, t]}(U_i), \quad \forall t \in [0, 1]^d. \quad (1.1)$$

Le théorème de la limite centrale montre que pour tout $t \in [0, 1]^d$, $\sqrt{n} [F_n(t) - \Pi(t)]$ converge en loi vers une gaussienne $N(0, \Pi(t) - \Pi(t)^2)$. De plus le théorème de la limite centrale vectoriel montre que pour tout $(t_1, \dots, t_d) \in [0, 1]^d$, le vecteur $(\sqrt{n} [F_n(t_i) - \Pi(t_i)], 1 \leq i \leq d)$ converge en loi vers un vecteur gaussien centré dont la matrice de covariance Σ est celle de $(1_{[0, t_i]}(U_1))_{1 \leq i \leq d}$. Si $d = 1$, la covariance du processus gaussien centré Z limite est $E(Z_s Z_t) = s \wedge t - s t$ pour tout $s, t \in [0, 1]$, c'est à dire la covariance du pont Brownien $W_t - t W_1$, où $(W_t, t \geq 0)$ désigne un Brownien standard. Le théorème suivant montre que la suite (F_n) des fonctions de répartition empiriques de la loi uniforme converge vers Π ; cette version du théorème de Kolmogorov-Smirnov est due à Doob-Donsker.

Théorème 1.5 Soit $(U_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi uniforme sur $[0, 1]^d$ et $(F_n, n \geq 1)$ la suite des fonctions de répartition empiriques associée. On note

$$D_\infty^*(n) = \sup\{|F_n(t) - \Pi(t)| : t \in [0, 1]^d\}.$$

(i) Si $d = 1$ et si $(W_t, t \in [0, 1])$ désigne un mouvement Brownien standard réel,

$$\sqrt{n} D_\infty^*(n) \rightarrow \sup\{|W_t - t W_1| : t \in [0, 1]\} \text{ en loi.}$$

De plus, pour tout $\lambda > 0$,

$$P\left(\sup_{t \in [0, 1]} |W_t - t W_1| \leq \lambda\right) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (-1)^j e^{-2j^2 \lambda^2}.$$

(ii) Si $d > 1$, il existe un processus Gaussien centré réel $(Z_t, t \in [0, 1]^d)$ à trajectoires continues de covariance

$$E(Z_s Z_t) = \Pi(s \wedge t) - \Pi(s) \Pi(t), \quad s, t \in [0, 1]^d,$$

et la suite $\sqrt{n} D_\infty^*(n)$ converge en loi vers $\sup\{|Z_t| : t \in [0, 1]^d\}$.

Le théorème suivant donne la vitesse de convergence « maximale » de $D_\infty^*(n)$ vers 0; cette loi du logarithme itéré est due à Chung et Kiefer.

Théorème 1.6 Soit $(U_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi uniforme sur $[0, 1]^d$; alors presque sûrement

$$\limsup_n \sqrt{\frac{2n}{\ln(\ln n)}} D_\infty^*(n) = 1.$$

L'intérêt de la discrédance d'une suite pour des problèmes d'approximation d'intégrale réside dans le résultat suivant pour les fonctions « à variation finie » (qui sont intégrables au sens de Riemann). Pour tout vecteur $x = (x_1, \dots, x_d) \in [0, 1]^d$, notons $\bar{x} = (1 - x_1, \dots, 1 - x_d)$ le symétrique de x par rapport au centre de l'hypercube $[0, 1]^d$ et pour toute fonction $f : [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}$, notons $\bar{f}(x) = f(\bar{x})$.

Définition 1.7 On dit qu'une fonction $f : [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}$ est à variation finie s'il existe une mesure à variation finie μ sur l'ensemble des boréliens de $[0, 1]^d$, dont le support est contenu dans $[0, 1]^d \setminus \{0\}$, telle que pour tout $x \in [0, 1]^d$:

$$\bar{f}(x) = \bar{f}(0) + \mu([0, x]).$$

Cette mesure μ est unique et la variation de f , notée $V(f)$ est égale à la variation totale $\|\mu\|$ de μ .

Le théorème suivant de Koksma et Hlawka relie l'approximation de l'intégrale de f par la moyenne de f le long d'une suite (X_n) à la discrédance de la suite.

Théorème 1.8 Soit $f : [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction à variation finie et $x = (x_n, n \geq 1)$ une suite équirépartie sur $[0, 1]^d$. Alors pour tout entier $n \geq 1$:

$$\left| \int_{[0, 1]^d} f(x) dx - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k) \right| \leq V(f) D_n^*(x).$$

La démonstration de ce théorème repose sur le lemme suivant.

Lemme 1.9 *Soit μ une mesure à variation finie sur $[0, 1]^d$, $\bar{\mu}$ l'image de μ par la symétrie $x \rightarrow \bar{x}$ par rapport au centre de l'hypercube $[0, 1]^d$ et pour tout $x \in [0, 1]^d$, notons $F(x) = \mu([0, x])$. Alors :*

$$\int_{[0,1]^d} \Pi(x) d\bar{\mu}(x) = \int_{[0,1]^d} F(x) dx.$$

Démonstration : Puisque $\Pi(x)$ est la fonction de répartition de la mesure de Lebesgue λ sur $[0, 1]^d$ calculée au point $x \in [0, 1]^d$ et que $\bar{\lambda} = \lambda$, le théorème de Fubini entraîne que :

$$\begin{aligned} \int_{[0,1]^d} \Pi(x) d\bar{\mu}(x) &= \int_{[0,1]^d} \int_{[0,1]^d} 1_{[0,x]}(y) dy d\bar{\mu}(x) \\ &= \int_{[0,1]^d} \int_{[0,1]^d} 1_{[0,\bar{x}]}(y) dy d\mu(x) \\ &= \int_{[0,1]^d} \int_{[0,1]^d} 1_{[0,\bar{y}]}(x) d\mu(x) dy \\ &= \int_{[0,1]^d} F(\bar{y}) dy = \int_{[0,1]^d} F(y) dy. \quad \square \end{aligned}$$

Démonstration du Théorème 1.8 : D'après la définition, $F = \bar{f} - \bar{f}(0)$ est la fonction de répartition de la mesure μ ; on en déduit en appliquant le Lemme 1.9 :

$$\begin{aligned} \int_{[0,1]^d} f(x) dx - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k) &= \int_{[0,1]^d} f(\bar{x}) dx - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \bar{f}(\bar{x}_k) \\ &= \int_{[0,1]^d} F(x) dx - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n F(\bar{x}_k) \\ &= \int_{[0,1]^d} \left[\Pi(x) - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n 1_{\{\bar{x} \leq \bar{x}_k\}} \right] d\bar{\mu}(x) \\ &= \int_{[0,1]^d} \left[\Pi(x) - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n 1_{\{x_k \leq x\}} \right] d\bar{\mu}(x). \end{aligned}$$

Ceci entraîne immédiatement :

$$\left| \int_{[0,1]^d} f(x) dx - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k) \right| \leq D_n^*(x) \|\bar{\mu}\| = D_n^*(x) \|\mu\|. \quad \square$$

Il est donc important de disposer de suites de discrédance aussi petite que possible.

Définition 1.10 *On dit qu'une suite $(x_n, n \geq 1)$ à valeurs dans $[0, 1]^d$ est à discrédance faible si sa discrédance $D_n^*(x)$ est asymptotiquement meilleure que la discrédance $D_\infty^*(n)$ d'une suite aléatoire $(U_n, n \geq 1)$ de loi uniforme sur $[0, 1]^d$.*

On peut prouver que la discrédance $D_n^*(x)$ d'une suite quelconque vérifie

$$\limsup_n \frac{n D_n^*(x)}{\ln(n)^{\frac{d}{2}}} \geq C_d,$$

où $C_d > 0$ est une constante ne dépendant que de la dimension d . Les meilleures discrédances connues sont asymptotiquement $O\left(\frac{\ln(n)^d}{n}\right)$ et cette discrédance est « presque » optimale. Nous indiquons quelques exemples de suites à discrédance faible. On en trouvera d'autres dans [19].

Suite de Van Der Corput Soit p un entier strictement supérieur à 1. Pour tout nombre entier positif n on note a_0, \dots, a_r les coefficients de la décomposition p -adique de x , c'est à dire les nombres entiers tels que :

$$n = a_0 + a_1 p + \dots + a_r p^r, \quad a_r > 0, \quad 0 \leq a_i < p \quad \text{pour} \quad 0 \leq i \leq r.$$

La suite de Van Der Corput en base p est donnée par

$$\phi_p(n) = \frac{a_0}{p} + \frac{a_1}{p^2} + \dots + \frac{a_r}{p^{r+1}}. \quad (1.2)$$

Ainsi, lorsque la décomposition p -adique de n est $n = a_r a_{r-1} \dots a_1 a_0$, celle de $\phi_p(n)$ est $\phi_p(n) = 0, a_0 a_1 \dots a_r$. La discrédance de la suite de Van Der Corput est

$$D_n^*(\phi) = O\left(\frac{\ln(n)}{n}\right).$$

Suites de Halton C'est la version d -dimensionnelle de la suite de Van Der Corput. Soit p_1, \dots, p_d des entiers strictement supérieurs à 1 et premiers entre eux (par exemple les d premiers nombres premiers). La suite de Halton est

$$x_n^d = (\phi_{p_1}(n), \dots, \phi_{p_d}(n)).$$

La discrédance d'une suite de Halton est

$$D_n^*(x^d) \leq \frac{1}{n} \prod_{i=1}^d \frac{p_i \ln(p_i n)}{\ln(p_i)} = O\left(\frac{(\ln(n))^d}{n}\right).$$

Suite de Faure Soit $p \geq d$ un entier premier et Δ_p l'ensemble des nombres x pour lesquels il existe un entier $K \geq 0$ tel que :

$$x = \sum_{i=0}^K \frac{a_i}{p^{i+1}}$$

et soit $T_p : \Delta_p \rightarrow \Delta_p$ l'application définie par

$$T_p\left(\sum_{i=0}^K \frac{a_i}{p^{i+1}}\right) = \sum_{i=0}^K \frac{b_i}{p^{i+1}} \quad \text{où} \quad b_i = \sum_{j=i}^K \frac{j!}{i!(j-i)!} a_j \pmod{p}.$$

Si ϕ_p est définie par (1.2), la suite de Faure de dimension d est alors :

$$x_n = (\phi_p(n-1), T_p(\phi_p(n-1)), \dots, T_p^{d-1}(\phi_p(n-1))).$$

La discrédance de cette suite est

$$D_n^*(x) = O\left(\frac{(\ln(n))^d}{n}\right).$$

Translations irrationnelles du tore Soit $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{R}^d$ un vecteur de nombres réels tel que la famille $\{1, \alpha_1, \dots, \alpha_d\}$ soit libre sur \mathbb{Q} (par exemple $\alpha = (\sqrt{p_1}, \dots, \sqrt{p_d})$ où p_1, \dots, p_d désignent les d premiers nombres premiers). Si $[x]$ désigne la partie entière de x , la suite $(x_n^\alpha, n \geq 1)$ est définie par

$$x_n^\alpha = (n\alpha_i - [n\alpha_i], 1 \leq i \leq d).$$

Pour tout $\varepsilon > 0$, la discrétion de la suite (x_n^α) est

$$D_n^*(x^\alpha) = O\left(\frac{1}{n^{1-\varepsilon}}\right).$$

Les sources C de ces diverses suites à discrétion faible peuvent être télé-chargées sur le site : <http://cermics.enpc.fr/~premia>.

2 Simulation de variables aléatoires.

2.1 Méthode d'inversion

On suppose que l'on sait simuler la réalisation d'un échantillon de loi uniforme sur $[0, 1]$, c'est à dire de variables aléatoires indépendantes $(X_n, n \geq 1)$ de même loi $\mathcal{U}([0, 1])$, par exemple en appelant la fonction **Random**. On cherche à simuler des réalisations de variables aléatoires réelles $(X_n, n \geq 1)$ indépendantes de même loi de fonction de répartition $F : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ définie par $F(t) = P(X_1 \leq t)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$.

Proposition 2.1 Notons $F^{-1} :]0, 1[\rightarrow \mathbb{R}$ la pseudo-inverse de F définie par

$$F^{-1}(u) = \inf\{t : F(t) \geq u\} \quad \text{pour tout } u \in]0, 1[.$$

Alors si U suit une loi $\mathcal{U}(]0, 1[)$, $F^{-1}(U)$ a pour fonction de répartition F .

Démonstration. Montrons tout d'abord que pour tout $u \in]0, 1[$ et $t \in \mathbb{R}$, $F^{-1}(u) \leq t$ si et seulement si $u \leq F(t)$. En effet, si $u \leq F(t)$, par définition $F^{-1}(u) \leq t$. Réciproquement, soit $y > t \geq F^{-1}(u)$; alors, puisque F est croissante, $F(y) \geq u$ et puisque F est continue à droite, $F(t) \geq u$.

On en déduit que si U suit une loi $\mathcal{U}(]0, 1[)$, pour tout $t \in \mathbb{R}$,

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

□

Si la fonction de répartition F de X est explicite, on en déduit que $(F^{-1}(U_n), n \geq 1)$ est un échantillon de la loi de X . Ceci fournit par exemple un algorithme de simulation lorsque :

Cas 1. X ne prend qu'un nombre fini ou dénombrable de valeurs On suppose que les valeurs prises par X sont $(a_i, 0 \leq i \leq N)$ ou bien $(a_i, i \in \mathbb{N})$ ordonnées de façon croissante, et que $P(X = a_i) = p_i$ pour tout i . On calcule alors $F_i = p_0 + \dots + p_i$ pour tout i et pour tout $u \in]0, 1[$ on note :

$$F^{-1}(u) = a_0 1_{\{u \leq F_0\}} + \sum_{i \geq 1} a_i 1_{\{F_{i-1} < u \leq F_i\}}.$$

Exemple d'une loi de Bernoulli de paramètre p : $P(X = 0) = q = 1 - p$ et $P(X = 1) = p$. On en déduit la simulation de n variables aléatoires indépendantes de même loi de Bernoulli de paramètre $p \in]0, 1[$ que l'on stocke dans le tableau X (en utilisant le fait que si U suit une loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, $1 - U$ suit aussi une loi $\mathcal{U}([0, 1])$) :

```
Pour  $k = 1, \dots, n$ 
Si (Random  $< p$ )
     $X[k] \leftarrow 1$ 
Sinon  $X[k] \leftarrow 0$ 
Fin
```

X ne prend qu'un nombre fini de valeurs : Si X prend $N + 1$ valeurs, en début de programme on calcule les valeurs de F_i que l'on stocke dans un tableau $F[i], i = 0, \dots, N$ et on stocke également les valeurs a_i dans un tableau $a[i]$. La boucle critique est alors la suivante :

```

i ← 0
U ← Random
Tantque (U > F[i])
    i ← i + 1
Fin
X[k] ← a[i]

```

X prend une famille dénombrable de valeurs : Si la variable X prend une famille dénombrable de valeurs, on stocke en début de programme dans un tableau $F[i], i = 0, \dots, N$ les premières valeurs de F_i , en s'arrêtant au premier entier N tel que F_N dépasse une valeur fixée, par exemple 0.999. Lorsque le tirage uniforme est supérieur à la valeur choisie (par exemple 0.999), on poursuit le calcul de la fonction de répartition.

Exemple d'une loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda)$ de paramètre $\lambda > 0$

$$P(X = 0) = e^{-\lambda} \quad \text{et pour } n \geq 0, \quad P(X = n + 1) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^{n+1}}{(n+1)!} = \frac{\lambda}{n+1} P(X = n).$$

La boucle principale de l'algorithme de simulation est alors la suivante (pour une loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda)$); elle fournit la valeur X :

```

PN ← F[N] - F[N - 1]
U ← Random
Si (U ≤ F[N])
    Alors
        X ← 0
        Tantque (U > F[X]) faire
            X ← X + 1
        Fin
    Sinon
        X ← N, P ← PN, F ← F[N]
        Tantque (U > F) faire
            X ← X + 1, P ← P * λ/X, F ← F + P
        Fin
Fin

```

Si $\lambda = 1$, $F[4] = 0.9963$ et $F[5] = 0.9994$, donc $N = 5$ avec le test d'arrêt précédent et sauf dans six cas sur 10 000, on utilise seulement 6 valeurs tabulées de la fonction de répartition. On verra plus loin une autre méthode pour simuler une loi de Poisson de paramètre λ reliée à la simulation de processus.

Cas 2. Loi $\mathcal{E}(\lambda)$ exponentielle de paramètre $\lambda > 0$ La densité de X est $f(x) = \lambda e^{-\lambda x} 1_{\{x>0\}}$ et la fonction de répartition est donc $F(t) = 0$ si $t \leq 0$ et $F(t) = 1 - e^{-\lambda t} < 1$ si $t > 0$. On en déduit pour $u \in [0, 1[$:

$$F^{-1}(u) = -\frac{\ln(1-u)}{\lambda}.$$

Puisque si U suit une loi $\mathcal{U}([0, 1])$, $1 - U$ suit également une loi $\mathcal{U}([0, 1])$, on en déduit un algorithme de simulation d'une loi exponentielle de paramètre λ :

$$X = -\ln(\text{Random})/\lambda$$

L'utilisation des lois exponentielles fournit une autre méthode de simulation de la loi de Poisson de paramètre λ .

Proposition 2.2 Soit $(E_i, i \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi exponentielle de paramètre $\lambda > 0$; alors pour tout entier $n \geq 1$,

$$p_n = P(E_1 + \dots + E_n \leq 1 < E_1 + \dots + E_{n+1}) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!}.$$

Démonstration : Pour tout entier $n \geq 1$,

$$\begin{aligned} p_n &= \int_{\{x_1 + \dots + x_n \leq 1 < x_1 + \dots + x_{n+1}\}} \lambda^{n+1} \exp(-\lambda(x_1 + \dots + x_{n+1})) dx_1 \dots dx_{n+1} \\ &= \int_{\{x_1 + \dots + x_n \leq 1\}} \lambda^n \exp(-\lambda(x_1 + \dots + x_n)) \exp(-\lambda[1 - (x_1 + \dots + x_n)]) dx_1 \dots dx_n \\ &= e^{-\lambda} \lambda^n \int_{\{x_1 + \dots + x_n \leq 1\}} dx_1 \dots dx_n = e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!}. \quad \square \end{aligned}$$

On en déduit qu'en simulant des variables aléatoires $(U_i, i \geq 1)$ indépendantes et de même loi $\mathcal{U}([0, 1])$, si n désigne le premier entier tel que $U_1 U_2 \dots U_{n+1} < e^{-\lambda}$, n suit une loi de Poisson $\mathcal{P}(\lambda)$, d'où un second algorithme de simulation d'une variable aléatoire X de loi $\mathcal{P}(\lambda)$:

```

a ← exp(-λ), X ← 0
U ← Random
Tantque (U > a) faire
    U ← U * Random, X ← X + 1
Fin

```

2.2 Méthode de rejet pour les lois uniformes

On suppose que l'on sait simuler par l'algorithme \mathcal{A} une variable aléatoire de loi uniforme sur un ensemble borélien $D \subset \mathbb{R}^d$ (par exemple le carré $]-1, +1[^2$) et que l'on veut simuler une variable aléatoire de loi uniforme sur un sous-ensemble borélien $C \subset D$. L'algorithme

```

Faire X ← A
Tantque C faux
Fin
Retourner X

```

donne une simulation de la loi uniforme sur C . En effet, soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de loi uniforme sur D et $\tau = \inf\{n \geq 1 : X_n \in C\}$; l'algorithme précédent retourne la variable aléatoire X_τ telle que pour tout sous-ensemble borélien $B \subset C$,

$$\begin{aligned} P(X_\tau \in B) &= \sum_{k=1}^{\infty} P(X_1 \notin C)^{k-1} P(X_k \in B) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{|C|}{|D|}\right)^{k-1} \frac{|B|}{|D|} = \frac{|B|}{|C|}. \end{aligned}$$

Ainsi, pour simuler une loi uniforme sur le disque unité, on procède comme suit :

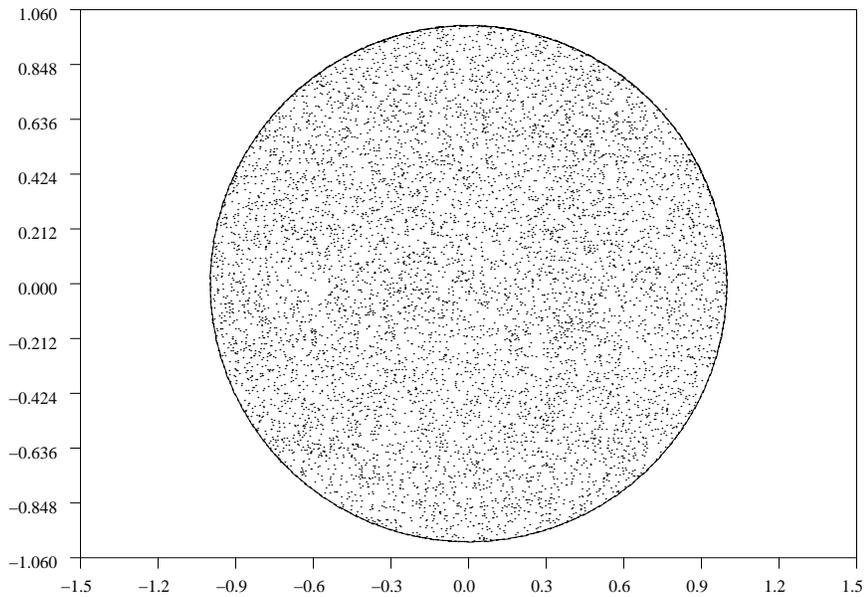
```

Faire   $U \leftarrow 2 * \text{Random} - 1$ 
        $V \leftarrow 2 * \text{Random} - 1$ 
Tantque ( $U * U + V * V > 1$ )
Fin
 $X \leftarrow U$  et  $Y \leftarrow V$ 

```

La figure suivante montre une méthode de rejet uniforme sur le cercle unité à partir d'une loi uniforme sur le carré $[0, 1]^2$. Sur 10 000 points tirés dans le carré, seuls 7 848 sont gardés car ils sont dans le cercle unité; on a par ailleurs $\pi/4 = 0,785\,398$.

FIG. 2 – Simulation de points suivant une loi uniforme dans le disque unité



2.3 Méthode de rejet générale

On veut simuler une variable aléatoire X dont la loi a pour densité f et on suppose qu'il existe une loi de densité g facilement simulable et une constante $c > 0$ telles que :

$$f(x) \leq c g(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Puisque f et g sont des densités, on a $c \geq 1$. L'idée de la méthode repose sur le résultat suivant :

Proposition 2.3 Soit f une densité sur \mathbb{R}^d et $D_f = \{(x, u) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^+ : 0 \leq u \leq f(x)\}$. Soit $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ et $U : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$ des variables aléatoires. Le couple (X, U) suit une loi uniforme sur D_f si et seulement si X a pour densité f et la loi conditionnelle de U sachant $X = x$ est uniforme sur l'intervalle $[0, f(x)]$.

Démonstration : Puisque $|D_f| = 1$, la densité de la loi uniforme sur D_f est

$$g(x, u) = 1_{D_f}(x, u) = f(x) \left[\frac{1}{f(x)} 1_{[0, f(x)]}(u) \right],$$

ce qui prouve l'équivalence annoncée. \square

On en déduit que simuler une variable aléatoire de densité f revient à tirer un point au hasard sous le graphe de f et retourner l'abscisse de ce point. Ce résultat peut être généralisé à une densité par rapport à une mesure quelconque et justifie la méthode de rejet suivante :

Proposition 2.4 Soit f et g des densités telles que $f \leq cg$; notons $q(x) = \frac{f(x)}{cg(x)} \in [0, 1]$. Soit Y_1 une variable aléatoire de densité g et U_1 une variable aléatoire de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ indépendante de Y_1 . Si $U_1 \leq q(Y_1)$, on pose $X = Y_1$. Sinon, on rejette X_1 et on simule une suite de variables aléatoires indépendantes Y_i de densité g et U_i de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ jusqu'à $\tau = \inf\{i \geq 1 : U_i \leq q(Y_i)\}$. Alors la variable aléatoire $X = Y_\tau$ a pour densité f , τ suit une loi géométrique de paramètre $\frac{1}{c}$ et $E(\tau) = c$.

Démonstration : Puisque f et g sont des densités de probabilité, on a :

$$P(U_1 > q(Y_1)) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y) dy \int_{\frac{f(y)}{cg(y)}}^1 du = 1 - \frac{1}{c}.$$

On en déduit que pour tout entier $k \geq 1$, $P(\tau = k) = (1 - \frac{1}{c})^{k-1} \frac{1}{c}$, tandis que pour tout $t \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} P(X \leq t) &= \sum_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{k-1} \int_{-\infty}^t g(y) dy \int_0^{\frac{f(y)}{cg(y)}} du \\ &= c \int_{-\infty}^t g(y) \frac{f(y)}{cg(y)} dy = \int_{-\infty}^t f(y) dy. \end{aligned}$$

Remarquons que cette méthode s'applique au cas où les variables aléatoires X et Y ont une densité par rapport à une même mesure (qui n'est pas obligatoirement la mesure de Lebesgue, mais peut être la mesure de comptage). \square

Application aux lois Gamma La méthode de rejet permet par exemple de simuler une variable aléatoire de loi $\Gamma(\lambda, a)$, c'est à dire de densité $f(x) = \frac{\lambda^a}{\Gamma(a)} \exp(-\lambda x) x^{a-1} 1_{]0, +\infty[}(x)$ où λ et a sont des paramètres strictement positifs et $\Gamma(a) = \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{a-1} dx$.

Si X et Y sont des variables aléatoires indépendantes de loi $\Gamma(\lambda, a)$ et $\Gamma(\lambda, b)$ respectivement, la variable aléatoire $X + Y$ suit une loi $\Gamma(\lambda, a + b)$. De plus, la loi $\Gamma(\lambda, 1)$ est une loi exponentielle $\mathcal{E}(\lambda)$, ce qui entraîne qu'une variable aléatoire de loi $\Gamma(\lambda, n)$ avec n entier supérieur ou égal à 1 peut être aisément simulée comme somme de n variables aléatoires indépendantes de même loi exponentielle $\mathcal{E}(\lambda)$.

Un changement de variables montre enfin que si Y suit une loi $\Gamma(1, a)$, la variable aléatoire $X = \frac{Y}{\lambda}$ suit une loi $\Gamma(\lambda, a)$.

D'après ce qui précède, pour simuler toutes les lois $\Gamma(\lambda, a)$, il suffit donc de savoir simuler une variable aléatoire de loi $\Gamma(1, a)$ pour un paramètre $a \in]0, 1[$, ce qui est possible par la méthode de rejet suivante de Ahrens et Dieter (1974) modifiée par Best (1983) (et qui ne nécessitera pas de calculer $\Gamma(a)$).

Soit $a \in]0, 1[$ et $f(x) = \frac{1}{\Gamma(a)} e^{-x} x^{a-1} 1_{]0, +\infty[}(x)$ et

$$g(x) = \frac{ae}{a+e} [x^{a-1} 1_{]0, 1[}(x) + e^{-x} 1_{[1, +\infty[}(x)] ;$$

alors $f \leq \frac{a+e}{ae\Gamma(a)} g$ et pour tout $x > 0$:

$$q(x) = \frac{f(x)}{\frac{a+e}{ae\Gamma(a)} g(x)} = e^{-x} 1_{]0,1[}(x) + x^{a-1} 1_{[1,+\infty[}(x).$$

Soit Y une variable aléatoire de densité g ; on peut aisément calculer la fonction de répartition G de Y et son inverse est définie pour $z \in]0, 1[$ par :

$$G^{-1}(z) = \left(\frac{a+e}{e} z \right)^{\frac{1}{a}} 1_{]0, \frac{e}{a+e}[}(z) - \ln \left((1-z) \frac{a+e}{ae} \right) 1_{[\frac{e}{a+e}, 1[}(z).$$

(1) On simule une variable aléatoire U de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, on calcule $Y = G^{-1}(U)$, puis on simule V de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ indépendante de U .

(2) Si $V \leq q(Y)$, on pose $X = Y$ et sinon on retourne en (1).

Cependant, si a est supérieur ou égal à 12, les bibliothèques de programmes donnent souvent une méthode alternative de simuler une loi $\Gamma(1, a)$ qui repose sur une méthode de rejet ; elle est théoriquement valable pour tout $a > 1$ et fait en moyenne moins d'appels au générateur pour les « grandes » valeurs de a . Soit $(U_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi $\mathcal{U}([0, 1])$. On note

$$Z_k = \text{tg}(\pi U_k) \quad \text{et} \quad Y_k = \sqrt{2a-1} Z_k + a - 1 ;$$

les variables aléatoires (Z_k) sont indépendantes et un changement de variables montre qu'elles suivent une loi de Cauchy de densité $\frac{1}{\pi} \frac{1}{1+z^2}$. On note $\tau = \inf\{k \geq 1 : Y_k > 0\}$ et on pose $Y = Y_\tau$. Pour toute fonction borélienne bornée Φ ,

$$E(\Phi(Y)) = \sum_{k=1}^{\infty} P \left(Z_k \leq \frac{1-a}{\sqrt{2a-1}} \right)^{k-1} \int_{\frac{1-a}{\sqrt{2a-1}}}^{+\infty} \Phi(\sqrt{2a-1} z + a - 1) \frac{1}{\pi} \frac{1}{1+z^2} dz ;$$

la densité de Y est donc

$$g(x) = \frac{1}{\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \text{Arctg}\left(\frac{1-a}{\sqrt{2a-1}}\right)} \times \frac{1}{\pi \sqrt{2a-1}} \times \frac{1}{1 + \frac{(x+1-a)^2}{2a-1}} \times 1_{\{x>0\}}.$$

On suppose que $a > 1$ et on note $h(x) = e^{-x} x^{a-1} \left[1 + \frac{(x+1-a)^2}{2a-1} \right]$ pour $x > 0$; le maximum de h sur $]0, +\infty[$ est atteint en $a - 1$, ce qui entraîne que pour tout $x > 0$:

$$\frac{1}{\Gamma(a)} e^{-x} x^{a-1} \leq c g(x) \quad \text{avec} \quad c = \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \text{Arctg}\left(\frac{1-a}{\sqrt{2a-1}}\right) \right] \pi \sqrt{2a-1} \frac{(a-1)^{a-1}}{\Gamma(a)} e^{1-a}.$$

Lorsque a est un entier supérieur ou égal à deux, pour tout $x > 0$ on a :

$$q(x) = \frac{f(x)}{c g(x)} = \left[1 + \left(\frac{x+1-a}{\sqrt{2a-1}} \right)^2 \right] \left(\frac{x}{a-1} \right)^{a-1} e^{-x+a-1}.$$

On en déduit l'algorithme suivant de simulation d'une loi $\Gamma(1, a)$ pour a entier (supérieur ou égal à 12 pour faire appel en moyenne à moins de 12 uniformes)

```

S ← √(2a - 1)
Faire (
  Faire (
    Z ← tg (π Random)
    Y ← S * Z + a - 1
  Tantque (Y ≤ 0))
Tantque ( Random >(1+Z*Z) *exp ((a - 1) * log (Y/(a - 1)) - S * Z) ) )
X ← Y

```

2.4 Lois gaussiennes réelles

La fonction de répartition d'une loi gaussienne centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$ n'est pas explicite et l'utilisation de cette fonction tabulée risque d'accumuler les erreurs. On dispose d'une méthode de simulation « exacte » dite de Box-Muller. Si X_1 et X_2 sont des variables aléatoires gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ centrées réduites indépendantes, alors les variables aléatoires X_i^2 , $i = 1, 2$ sont indépendantes et un changement de variable montre qu'elles suivent une loi Gamma $\Gamma(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ de densité $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x} x^{-\frac{1}{2}} 1_{]0, +\infty[}(x)$. La variable aléatoire $R^2 = X_1^2 + X_2^2$ suit donc une loi exponentielle de paramètre $\frac{1}{2}$. Si on pose $X_1 = R \cos(\theta)$ et $X_2 = R \sin(\theta)$, un changement de variable montre que θ suit une loi uniforme sur l'intervalle $[0, 2\pi]$ et est indépendante de R . On en déduit la

Proposition 2.5 *Soit U_1 et U_2 des variables aléatoires indépendantes de même loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$; alors les variables aléatoires*

$$X_1 = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \cos(2\pi U_2) \quad \text{et} \quad X_2 = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \sin(2\pi U_2)$$

sont gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes.

(On pourra montrer cette proposition directement à titre d'exercice).

Cependant, afin de gagner éventuellement du temps de calcul, on peut éviter de faire appel à des fonctions trigonométriques en utilisant une « méthode de rejet ». La méthode suivante est l'algorithme polaire; d'autres méthodes sont proposées en exercice. Soit U_1 et V_1 des variables aléatoires indépendantes de loi uniforme sur l'intervalle $[-1, +1]$. On calcule $\rho_1^2 = U_1^2 + V_1^2$; si $\rho_1^2 \geq 1$, on rejette (U_1, V_1) et on tire deux nouvelles variables aléatoires indépendantes (U_2, V_2) de loi uniforme sur l'intervalle $[-1, +1]$. On procède ainsi jusqu'à $\tau = \inf\{i \geq 1 : \rho_i^2 = U_i^2 + V_i^2 < 1\}$. Soit $Z = \sqrt{\frac{-2 \ln(\rho_\tau^2)}{\rho_\tau^2}}$; alors les variables aléatoires

$$X = U_\tau Z \quad \text{et} \quad Y = V_\tau Z$$

sont gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes. En effet, l'application

$$T : \{(u, v) \in]-1, +1[^2 : 0 < u^2 + v^2 < 1\} \rightarrow \mathbb{R}^2 \setminus (0, 0)$$

définie par $T(u, v) = \left(u \sqrt{\frac{-2 \ln(u^2+v^2)}{u^2+v^2}}, v \sqrt{\frac{-2 \ln(u^2+v^2)}{u^2+v^2}} \right)$ est un \mathcal{C}_1 difféomorphisme d'application réciproque $T^{-1}(x, y) = \left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{4}\right), \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{4}\right) \right)$ et le jacobien de

T^{-1} est égal à $-\frac{1}{2} \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2}\right)$. Pour toute fonction borélienne $\phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^+$, on a donc

$$\begin{aligned} E[\phi(X, Y)] &= \sum_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\pi}{4}\right)^{k-1} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{1}{4} 1_{\{0 < u^2 + v^2 < 1\}} \\ &\quad \times \phi\left(u \sqrt{\frac{-2 \ln(u^2 + v^2)}{u^2 + v^2}}, v \sqrt{\frac{-2 \ln(u^2 + v^2)}{u^2 + v^2}}\right) du dv \\ &= \frac{4}{\pi} \frac{1}{4} \int \int_{\mathbb{R}^2} \phi(x, y) \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) dx dy \\ &= \int \int_{\mathbb{R}^2} \phi(x, y) \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) dx dy. \end{aligned}$$

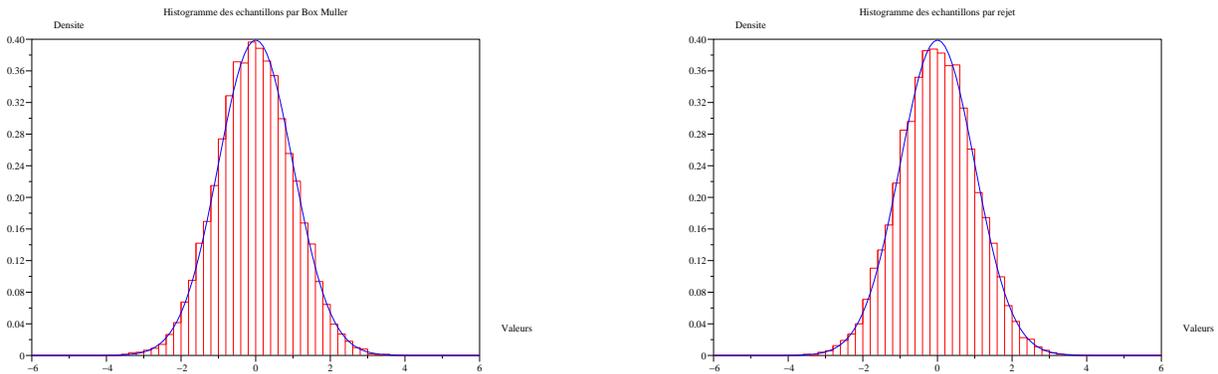
On en déduit la simulation de deux variables aléatoires gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes par l'algorithme polaire :

```

Faire  U ← 2 * Random - 1
         V ← 2 * Random - 1
Tantque (U * U + V * V ≥ 1)
Fin
        Z = sqrt(-2 log(U * U + V * V)/(U * U + V * V))
        X ← Z * U
        Y ← Z * V

```

FIG. 3 – Histogrammes de densité de loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ par Box-Muller et par rejet



Les figures ci-dessus montrent les histogrammes de simulation de variables aléatoires Gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ à l'aide de 10 000 couples de tirages uniformes indépendants par la méthode de Box-Muller puis par la méthode de rejet précédente, ainsi que le graphe de la densité théorique.

Les temps de calcul de la méthode de Box-Muller et par la méthode du rejet (en simulant des couples de variables de loi Gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$) utilisant $2N$ tirages uniformes, donnés par la fonction `timer()` de Scilab sont :

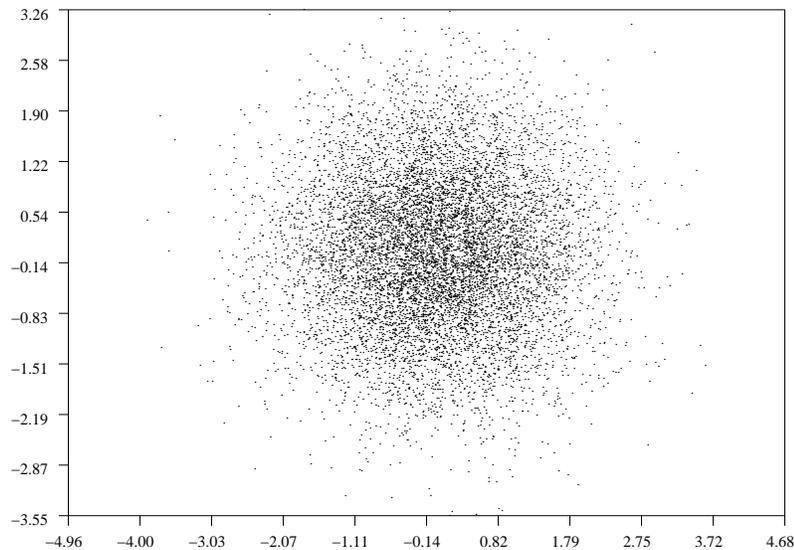
$2N$	20 000	40 000	60 000	80 000
Box-Muller	0.38	0.76	1.15	1.53
Polaire	0.55	1.11	1.66	2.23

On voit que la méthode de Box-Muller est un peu plus rapide en dépit du calcul des fonctions trigonométriques. Si l'on définit une procédure de simulation d'une seule variable aléatoire de loi gaussienne en ne conservant que $X = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \sin(2\pi U_2)$ par la méthode de Box-Muller ou $\sqrt{-2 \ln(U^2 + V^2)} \frac{V}{U^2 + V^2}$ dans la méthode du rejet, la méthode de Box-Muller devient presque deux fois plus rapide, comme le montre le tableau suivant des temps de simulation de N tirages de variables aléatoires $\mathcal{N}(0, 1)$ en ne gardant que l'une des deux composantes :

N	20 000	40 000	60 000	80 000
Box-Muller	0.54	1.07	1.6	2.14
Polaire	1.01	2	2.99	4.03

La figure suivante montre la simulation de 10 000 couples de variables aléatoires $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes ; la moyenne empirique de l'abscisse est - 0.0001353 et la moyenne empirique de l'ordonnée est 0.0011352.

FIG. 4 – Simulation de 10 000 couples de gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes



Pour simuler une variable aléatoire gaussienne Z de loi $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$ avec $\sigma > 0$, il suffit de simuler une variable aléatoire \tilde{Z} de loi $\mathcal{N}(0, 1)$ et de poser $Z = m + \sigma \tilde{Z}$.

Si F désigne la fonction de répartition d'une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$, signalons enfin les procédures suivantes (en Scilab) de calcul approché de F et de F^{-1} qui peuvent être utiles dans certains cas.

```

Calcul approché de  $F(t)$ 
function [rep]=rep_gauss(x)
P= 0.2316419 ;
b1= 0.319381530 ; b2= -0.356563782 ; b3= 1.781477937 ;
b4= -1.821255978 ; b5= 1.330274429 ;
unsurrac2pi = 0.39894228 ;
if(x >= 0.0) then
t = 1.0 / (1.0 + P * x) ;
rep = 1.0 - unsurrac2pi * exp(- x*x /2.0) * t * (t * (t * (t * (t * b5 + b4) +
b3) + b2 ) + b1) ;
else
t = 1.0 / (1.0 - P*x) ;
rep = unsurrac2pi * exp(- x*x/2.0)* t * (t * (t * (t * (t * b5 + b4) + b3) + b2
) + b1 ) ;
end ;
endfunction

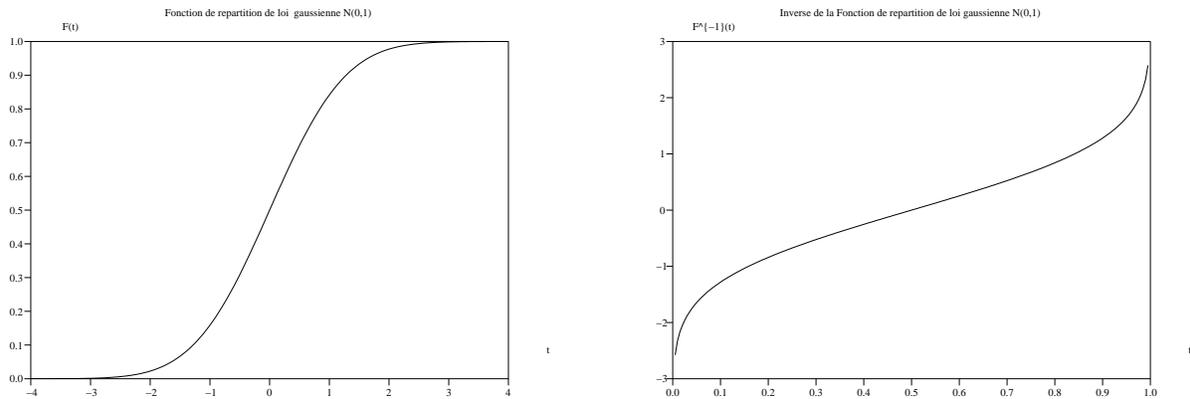
```

```

Calcul approché de  $F^{-1}(t)$  pour  $0 < t < 1$ 
function [inverse]=inverse_N(x)
c0= 2.515517 ; c1= 0.802853 ; c2= 0.010328 ;
d1= 1.432788 ; d2= 0.189269 ; d3= 0.001308 ;
if (x>0.5) then signe = +1.0 ; x=1.0-x ;
else signe = -1.0 ;
end
t=sqrt(-2.0 * log(x)) ;
inverse = signe * (t-((c2*t+c1)*t+c0)/(1.0+t*(d1+t*(d2+d3*t)))) ;
endfunction

```

FIG. 5 – Graphes de F et F^{-1} où F est la fonction de répartition de la gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$



2.5 Vecteurs gaussiens

Pour simuler un vecteur gaussien $X = (X_1, \dots, X_d)$ d'espérance $m = (m_1, \dots, m_d)$ et de matrice de covariance Σ , il suffit de simuler un vecteur gaussien centré $Y = (Y_1, \dots, Y_d)$ de

matrice de covariance Σ et de poser $X_i = Y_i + m_i$ pour $i = 1, \dots, d$; dans la suite on suppose donc que $m = 0$. Si la matrice de covariance Σ est diagonale, c'est à dire si les composantes du vecteur gaussien sont indépendantes, il suffit de simuler successivement d variables aléatoires gaussiennes réelles. Sinon, puisque Σ est symétrique de type positif (puisque pour tout vecteur $v \in \mathbb{R}$, $\langle v, \Sigma v \rangle = \text{Var}(\langle v, X \rangle) \geq 0$), un résultat classique d'algèbre linéaire permet d'écrire la décomposition de Cholevsky de Σ , c'est à dire de trouver une matrice A triangulaire inférieure telle que $\Sigma = A A^*$. Il suffit alors de simuler un vecteur gaussien $Z = (Z_1, \dots, Z_d)$ dont les composantes sont gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes, puis de calculer $X = A Z$ (où on commet l'abus de langage consistant à identifier un vecteur de \mathbb{R}^d et la matrice colonne de ses coefficients dans la base canonique); le vecteur X est clairement gaussien, centré de matrice de covariance Σ . Rappelons que lorsque la matrice $\Sigma = (S_{i,j}, 1 \leq i, j \leq d)$ est définie positive, la décomposition de Cholesky de Σ (qui est disponible dans de nombreuses bibliothèques de programmes) est calculée de la façon suivante :

$$a_{1,1} = \sqrt{S_{1,1}}, \quad a_{i,1} = \frac{S_{1,i}}{a_{1,1}} \quad \text{pour } 2 \leq i \leq d,$$

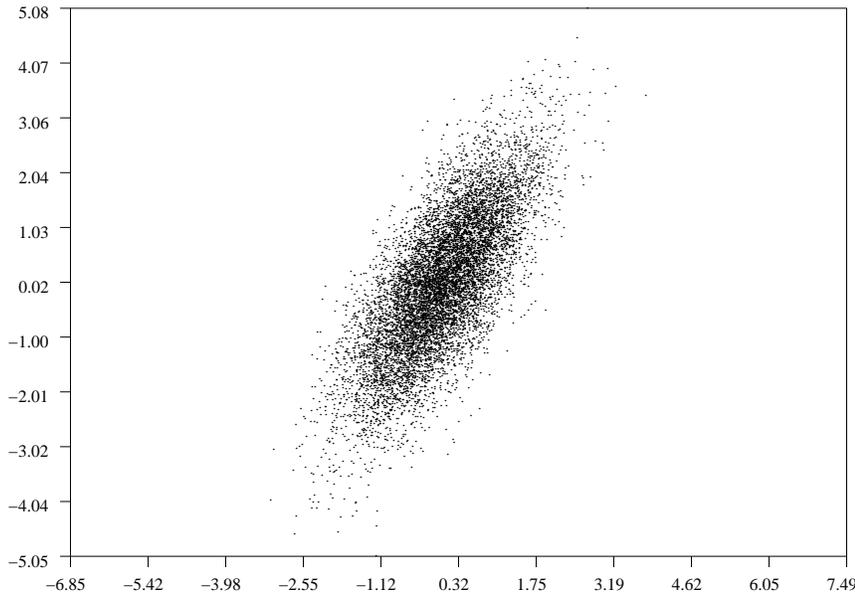
pour i croissant de 2 à d : $a_{i,i} = \sqrt{S_{i,i} - \sum_{1 \leq k \leq i-1} |a_{i,k}|^2}$,

pour $i < j \leq d$

$$a_{j,i} = \frac{S_{i,j} - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k} a_{j,k}}{a_{i,i}}, \quad a_{i,j} = 0.$$

La figure ci-dessous montre la simulation de 10 000 vecteurs X dans \mathbb{R}^2 , centrés et de matrice

FIG. 6 – Simulation de 10 000 couples de gaussiennes corrélées



de covariance $\Sigma = \begin{pmatrix} \frac{11}{16} & \frac{7\sqrt{3}}{16} \\ \frac{7\sqrt{3}}{16} & \frac{25}{16} \end{pmatrix}$: La moyenne empirique de la première composante est -0.0015815 , celle de la seconde composante est 0.0027786 , la variance empirique de la première composante est 0.6772414 alors que $\frac{11}{16} = 0.6875$, celle de la seconde composante est 1.5607471 alors que $\frac{25}{16} = 1.5625$ et la covariance empirique est 0.7520688 alors que $\frac{7\sqrt{3}}{16} = 0.7577722$.

Dans le cas particulier $d = 2$, $\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho \sigma_1 \sigma_2 \\ \rho \sigma_1 \sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$, on a $A = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ \rho \sigma_2 & \sigma_2 \sqrt{1 - \rho^2} \end{pmatrix}$.
Donc si Z_1 et Z_2 sont des variables aléatoires gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes, $X_1 = m_1 + \sigma_1 Z_1$, $X_2 = m_2 + \sigma_2(\rho Z_1 + \sqrt{1 - \rho^2} Z_2)$, le vecteur $X = (X_1, X_2)$ est gaussien de vecteur espérance $m = (m_1, m_2)$ et de matrice de covariance Σ .

2.6 Quelques autres lois classiques

Loi géométrique $\mathcal{G}(a)$, $a \in]0, 1[$. C'est la loi du premier instant où on obtient un succès en répétant des expériences indépendantes de même loi qui donnent un succès avec la probabilité $1 - a$. On a donc pour tout entier $n \geq 1$, $P(X = n) = (1 - a) a^{n-1}$. L'algorithme suivant simule une loi $\mathcal{G}(a)$.

```

X ← 0
Faire (
    X ← X + 1
    Tantque Random < a )
Fin
Retourner X

```

A titre d'exercice, calculer la loi de la variable aléatoire simulée par l'algorithme suivant :

```

X ← 0
Tantque Random < a
Faire ( X ← X + 1 )
Fin
Retourner X

```

Chi-deux. Un changement de variables montre que le carré d'une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ suit une loi $\Gamma(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; on en déduit que si les variables aléatoires X_k , $1 \leq k \leq n$ sont indépendantes de même loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$, la variable aléatoire $Z_n = \sum_{k=1}^n X_k^2$, qui est un χ_n^2 , c'est à dire un Chi-deux à n degrés de liberté, suit une loi Gamma $\Gamma(\frac{n}{2}, \frac{1}{2})$. Si $n = 2N$ est un entier pair, un χ_n^2 est une somme de N exponentielles indépendantes de paramètre $\frac{1}{2}$ tandis que si $n = 2N + 1$ est un entier impair, un χ_n^2 est la somme de N exponentielles indépendantes de paramètre $\frac{1}{2}$ et du carré d'une gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendante des exponentielles.

Loi Beta $\beta(a, b)$, $a > 0$, $b > 0$. Elle a pour densité $f(x) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} x^{a-1} (1-x)^{b-1} 1_{]0,1[}(x)$. Montrer que pour tout $\lambda > 0$, si X et Y sont des variables aléatoires indépendantes de loi $\Gamma(\lambda, a)$ et $\Gamma(\lambda, b)$ respectivement, les variables aléatoires $X + Y$ et $\frac{X}{X+Y}$ sont indépendantes de loi respectives $\Gamma(\lambda, a + b)$ et $\beta(a, b)$. En déduire un algorithme de simulation d'une loi $\beta(a, b)$. Un autre algorithme de simulation d'une loi $\beta(a, b)$ pour $a, b < 1$, du à Jönk (1964), est proposé dans l'exercice 2.10.

Loi log-normale. C'est la loi de $X = e^Y$ lorsque Y suit une loi normale $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$; sa densité est $f(x) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (\ln(x) - m)^2\right) 1_{\{x>0\}}$, son espérance est $E(X) = \exp\left(m + \frac{\sigma^2}{2}\right)$

et sa variance est $\text{Var}(X) = \exp(2(m+\sigma^2)) - \exp(2m+\sigma^2)$. Écrire un algorithme de simulation de cette loi.

Loi de Pareto. C'est la loi de $X = r e^Y$ lorsque $r > 0$ et Y suit une loi exponentielle de paramètre $\alpha > 0$. Sa densité est $f(x) = \frac{\alpha r^\alpha}{x^{\alpha+1}} 1_{\{x>r\}}$ et sa fonction de répartition est $F(t) = [1 - (\frac{r}{t})^\alpha] 1_{\{t>r\}}$. La variable aléatoire X n'est pas intégrable si $\alpha \leq 1$ et n'est pas de carré intégrable si $\alpha \leq 2$. Si $\alpha > 1$, $E(X) = \frac{\alpha r}{\alpha-1}$ et si $\alpha > 2$, $\text{Var}(X) = \frac{\alpha r^2}{(\alpha-1)^2(\alpha-2)}$. Écrire un algorithme de simulation de cette loi.

Loi de Weibull $W(\alpha, \theta)$, $\alpha > 0$, $\theta > 0$. Sa densité est $f(x) = \alpha \theta x^{\alpha-1} \exp(-\theta x^\alpha) 1_{\{x>0\}}$, sa fonction de répartition est $F(t) = [1 - \exp(-\theta t^\alpha)] 1_{\{t>0\}}$, son espérance est $\frac{\Gamma(1+\frac{1}{\alpha})}{\theta^{\frac{1}{\alpha}}}$ et sa variance est $\frac{\Gamma(1+\frac{2}{\alpha}) - \Gamma(1+\frac{1}{\alpha})^2}{\theta^{\frac{2}{\alpha}}}$. Montrer que si Y suit une loi exponentielle de paramètre $\theta > 0$, $X = Y^{\frac{1}{\alpha}}$ suit une loi de Weibull $W(\alpha, \theta)$. En déduire un algorithme de simulation d'une loi de Weibull $W(\alpha, \theta)$.

2.7 Méthode de décomposition

On cherche à simuler une variable aléatoire de densité $f = \sum_n p_n f_n$ par rapport à une mesure μ sur la tribu des boréliens de \mathbb{R}^d où $(p_n, n \geq 0)$, désigne une probabilité sur \mathbb{N} et pour tout entier $n \geq 0$, f_n désigne une densité par rapport à μ . Soit $(X_n, n \geq 0)$ une suite de variables aléatoires indépendantes telles que X_n a pour densité f_n par rapport à μ et soit $\tau : \Omega \rightarrow \mathbb{N}$ une variable aléatoire indépendante de la suite (X_n) et de loi $(p_n, n \geq 0)$. Alors la variable aléatoire X_τ a pour densité f par rapport à μ . En effet, pour tout borélien B de \mathbb{R}^d , le théorème de Fubini entraîne que :

$$\begin{aligned} P(X_\tau \in B) &= \sum_{n \geq 0} P(\tau = n) P(X_\tau \in B | \tau = n) \\ &= \sum_{n \geq 0} p_n \int_B f_n(x) \mu(dx) \\ &= \int_B \sum_{n \geq 0} p_n f_n(x) \mu(dx) = \int_B f(x) \mu(dx). \end{aligned}$$

Cette méthode est particulièrement intéressante lorsque les densités f_n sont à support disjoints, par exemple lorsqu'on veut simuler une loi uniforme sur la réunion D d'ensembles disjoints D_n ; on pose alors $p_n = \frac{|D_n|}{|D|}$. C'est par exemple le cas si l'on souhaite simuler une densité à support compact linéaire par morceaux. Si U_1 et U_2 sont des variables aléatoires indépendantes de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, la densité de $Max = \max(U_1, U_2)$ est $2x$ et celle de $Min = \min(U_1, U_2)$ est $2(1-x)$. On déduit par exemple de la Proposition 2.3 l'algorithme suivant de simulation d'une variable aléatoire de densité f définie par $f(x) = 0$ si $x \leq 0$ ou $x \geq 7$ et pour $0 < x < 7$,

$$f(x) = \begin{cases} \frac{3x}{10} & \text{si } x \in]0, 1], \\ \frac{4-x}{10} & \text{si } x \in]1, 3], \\ \frac{x-2}{10} & \text{si } x \in]3, 4], \\ \frac{7-x}{15} & \text{si } x \in]4, 7[. \end{cases}$$

On décompose l'ensemble $D_f = \{(x, u) : 0 < x < 7, 0 \leq u \leq f(x)\}$ en cinq ensembles disjoints $D_1 = \{(x, u) : 0 < x \leq 1, 0 \leq u \leq f(x)\}$, $D_2 = \{(x, u) : 1 < x \leq 4, 0 \leq u \leq \frac{1}{10}\}$, $D_3 = \{(x, u) : 4 < x < 7, 0 \leq u \leq f(x)\}$, $D_4 = \{(x, u) : 1 < x < 3, \frac{1}{10} \leq u \leq f(x)\}$,

$D_5 = \{(x, u) : 3 < x < 4, \frac{1}{10} < u \leq f(x)\}$. Les surfaces sont respectivement : $|D_1| = \frac{3}{20}$, $|D_2| = \frac{3}{10}$, $|D_3| = \frac{3}{10}$, $|D_4| = \frac{2}{10}$ et $|D_5| = \frac{1}{20}$. On simule donc une variable aléatoire U de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, puis suivant le résultat obtenu, on choisit un point au hasard dans chaque zone 1 à 5 en gardant à chaque fois l'abscisse du point tiré (ce qui revient dans certains cas à simuler directement la densité f_n). On a $f_1(x) = 2x 1_{[0,1]}(x)$, $f_2(x) = \frac{1}{3} 1_{[1,4]}(x)$, $f_3(x) = \frac{2}{9} (7-x) 1_{[4,7]}(x)$, $f_4(x) = \frac{1}{2} (3-x) 1_{[1,3]}(x)$ et $f_5(x) = 2(x-3) 1_{[3,4]}(x)$; l'algorithme suivant retourne la valeur \mathbf{X} :

```

U ← Random
Si U ≤ 0.15
    Faire ( X ← Max( Random, Random ) )
Si 0.15 < U ≤ 0.45
    Faire ( X ← 3*Random+1 )
Si 0.45 < U ≤ 0.75
    Faire ( X ← Min(3*Random, 3*Random)+4 )
Si 0.75 < U ≤ 0.95
    Faire ( X ← Min(2*Random, 2*Random)+1 )
Si 0.95 < U ≤ 1
    Faire ( X ← Max(Random, Random)+3 )

```

2.8 Simulation de vecteurs aléatoires

- Si les composantes du vecteur sont indépendantes, il suffit de simuler chaque composante.
- On peut simuler une composante, puis des lois conditionnelles successives. Ainsi, si (X, Y) désigne un couple de variables aléatoires réelles ou vectorielles de densité $f(x, y)$, la densité de X est $f_X(x) = \int f(x, y) dy$ et la densité conditionnelle de Y sachant $X = x$ est $f(y|x) = \frac{f(x, y)}{f_X(x)}$. Pour simuler le couple (X, Y) , on simule d'abord X de densité f_X , puis ayant obtenu la valeur réelle (ou vectorielle) x , on simule Y de densité $f(\cdot|x)$ indépendamment de X . En procédant ainsi pas à pas, on peut simuler des vecteurs aléatoires de dimension quelconque.

- On peut enfin utiliser les changements de variables, comme on l'a fait dans la méthode de Box-Muller pour couple de variables gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes.

2.9 Méthode de mélange

On suppose que la densité de la loi que l'on veut simuler est

$$f(x) = \int g(x, y) dy,$$

où g est une fonction borélienne positive. Puisque f est une densité, le théorème de Fubini montre que $\int g(x, y) dx dy = \int f(x) dx = 1$, c'est à dire que g est une densité. Si (X, Y) désigne un couple de densité g , la densité de Y est $g_Y(y) = \int g(x, y) dx$ tandis que la densité conditionnelle de X sachant $Y = y$ est $g(x|y) = \frac{g(x, y)}{g_Y(y)}$. Si densités g_Y et $g(\cdot|y)$ sont aisément simulables, on simule d'abord Y de densité g_Y , puis ayant obtenu y on simule la densité conditionnelle $g(\cdot|y)$ indépendamment de Y , ce qui fournit une simulation de X de densité f . De nouveau, les densités considérées ne sont pas nécessairement par rapport à la mesure de Lebesgue, mais peuvent être prises par rapport à une mesure positive σ -finie quelconque.

Par exemple, si n est un paramètre strictement positif, pour simuler une densité la densité définie par $f(x) = n \int_1^{+\infty} y^{-n} e^{-xy} dy$ sur $[0; +\infty[$, on a $g(x, y) = n y^{-n} e^{-xy} 1_{[0, +\infty[}(x) 1_{[1, +\infty[}(y)$.

On en déduit que $g_Y(y) = n y^{-(n+1)} 1_{[1,+\infty[}(y)$ et que pour $y \geq 1$, $g(x|y) = y e^{-xy} 1_{[0,+\infty[}(x)$, c'est à dire que la loi conditionnelle de X sachant $Y = y$ est exponentielle de paramètre y . La fonction de répartition de la loi de Y est $F_Y(t) = (1 - t^{-n}) 1_{[1,+\infty[}(t)$ et $F_Y^{-1}(u) = (1 - u)^{-\frac{1}{n}} 1_{[0,1[}(u)$. Puisque si U suit une loi $\mathcal{U}([0, 1])$, $1 - U$ suit également une loi $\mathcal{U}([0, 1])$, en déduit l'algorithme suivant de simulation de X :

```

Y ← exp( - log( Random ) / n )
X ← - log (Random) /Y
Retourner X

```

2.10 Exercices

Exercice 2.1 Déterminer la loi de la variable aléatoire X simulée par les algorithmes suivants :

1) On note $\text{Int}(x)$ la partie entière du nombre réel x

```

N ← Int( Random *5 )
X ← Int( Random *N )

```

2)

```

X ← 0 ; Y ← 1
Tantque ( Random < Y )
  Faire ( X ← X+1 ; Y ← Y/2 )
Fin

```

3)

```

N ← 0
Répéter n fois
  Si (Random < p1) faire N ← N+1
  Fin
Fin
X ← 0
Répéter N fois
  Si (Random < p2) faire X ← X+1
  Fin
Fin

```

4)

```

P ← p ; F ← P ; X ← 1
Tantque (Random > F) faire
  P ← P * (1-p) ; F ← F+P ; X ← X+1
Fin

```

Exercice 2.2 Soit $0 < a < 1$; montrer que l'algorithme suivant permet de simuler une loi Gamma $\Gamma(a, 1)$:

```

p ← e / (a+e)
Faire
  U ← Random, V ← Random
  Si U < p
    X ← exp( (1/a) * log(V) )
    q ← exp( -X )
  Sinon
    X ← 1 - log(V)
    q ← exp( (a-1) * log(X) )
  Fin
Tantque ( Random >= q)
Retourner X

```

Exercice 2.3 Écrire un algorithme de simulation pour les lois suivantes :

- par inversion de la fonction de répartition
- par rejet par rapport de la loi uniforme sur l'ensemble des valeurs prises et calculer le nombre moyen d'appels à **Random** dans la méthode du rejet et comparer les vitesses d'exécution des deux méthodes :

1) Loi binomiale $\mathcal{B}(5, 0.5)$.

2) Loi sur $\{1, \dots, n\}$ définie par $P(X = k) = \frac{n+1}{n(k^2+k)}$ pour $1 \leq k \leq n$.

Exercice 2.4 Comparer l'efficacité de la méthode de simulation d'une loi géométrique de paramètre $a \in]0, 1[$ décrite dans la section 2.6 et la méthode d'inversion de la fonction de répartition.

Exercice 2.5 Soit $n \geq 1$ un entier fixé, P_1 et P_2 des probabilités sur $\{1, \dots, n\}$ définies par :

$$\begin{aligned}
P_1(1) &= 1/(2n-1), \\
P_1(k) &= 2/(2n-1), \quad \forall k \in \{2, \dots, n\}, \\
P_2(k) &= 3/(3n-2), \quad \forall k \in \{1, \dots, n-1\}, \\
P_2(n) &= 1/(3n-2).
\end{aligned}$$

Soit P_3 la probabilité sur $\{1, \dots, 2n\}$ définie par

$$P_3(k) = \begin{cases} (1/3) P_1((k+1)/2) & \text{si } k \text{ est impair,} \\ (2/3) P_2(k/2) & \text{si } k \text{ est pair.} \end{cases}$$

1. Écrire un algorithme de simulation de P_1 en appliquant la méthode de rejet par rapport à la loi uniforme sur $\{1, \dots, n\}$. Quel est le nombre moyen d'appels à **Random** ?
2. Écrire un algorithme de simulation de P_2 en appliquant la méthode de rejet par rapport à la loi uniforme sur $\{1, \dots, n\}$. Quel est le nombre moyen d'appels à **Random** ?
3. Écrire un algorithme de simulation de P_3 en appliquant la méthode de rejet par rapport à la loi uniforme sur $\{1, \dots, 2n\}$. Quel est le nombre moyen d'appels à **Random** ?
4. En utilisant les deux premières questions et la méthode de décomposition de P_3 , écrire un algorithme de simulation de P_3 . Quel est le nombre moyen d'appels à **Random** ?

Exercice 2.6 Écrire un algorithme de simulation pour les lois suivantes sur \mathbb{N}^2 :

- 1) $P(k, n) = \frac{e^{-1}}{k! 2^{n+1}}, \forall (k, n) \in \mathbb{N}^2$.
- 2) $P(k, n) = \frac{e^{-n} n^k}{k! 2^{n+1}}, \forall (k, n) \in \mathbb{N}^2$.

Exercice 2.7 Soit X une variable aléatoire dont la loi est symétrique par rapport à 0, c'est à dire telle que X et $-X$ ont la même loi. Soit S une variable aléatoire indépendante de $|X|$, telle que $P(S = 1) = P(S = -1) = \frac{1}{2}$. Montrer que $Z = |X|S$ a même loi que X . En déduire un algorithme de simulation d'une variable aléatoire X de densité $f(x) = \frac{\lambda}{2} \exp(-\lambda|x|)$ pour une constante $\lambda > 0$.

Exercice 2.8 Montrer que pour tout $x \geq 0$, $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2}) \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{1}{2}} e^{-x}$. En utilisant l'exercice précédent, en déduire un algorithme de simulation d'une loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$. Implémenter cet algorithme, la méthode de Box-Muller et l'algorithme polaire, faire tracer les histogrammes dans les trois cas (fonction `histplot` en Scilab) d'un échantillon, le comparer à la densité théorique et comparer l'efficacité de ces trois algorithmes (fonction `Scilabtimer()` en Scilab).

Exercice 2.9 Soit f la densité de probabilité définie par

$$f(x) = \frac{2}{3} [x 1_{[0,1]}(x) + 1_{[1,2]}(x)].$$

1. Écrire un algorithme de simulation de f par la méthode d'inversion de la fonction de répartition.
2. Écrire un algorithme de simulation de f par la méthode de rejet à partir de la loi uniforme sur $[0, 2]$.
3. Soit Y et Z des variables aléatoires indépendantes de loi uniforme respectivement sur $[0, 1]$ et sur $[0, 2]$. Quelle est la densité de $S = \max(Y, Z)$? En déduire un algorithme de simulation de X .
4. Montrer que la variable aléatoire fournie par l'algorithme suivant a pour densité f :


```

      U ← Random
      Si ( U < 1/3 )
        faire X ← 3*U+1
      sinon
        faire X ← Max( 3*(U-1/3)/2, 2*Random)
      Fin
      
```
5. Implémenter les programmes de ces quatre algorithmes. Les comparer pour le temps d'exécution (par la fonction `timer()` de Scilab) et pour le nombre d'appels au générateur.

Exercice 2.10 Algorithme de Jönk pour la simulation d'une loi $\beta(a, b)$.

Soit $a, b \in]0, 1[$, $(U_1(n), n \geq 1)$ et $(U_2(n), n \geq 1)$ des suites indépendantes de variables aléatoires indépendantes de même loi $\mathcal{U}([0, 1])$.

Soit $V_1 = U_1(1)^{\frac{1}{a}}$, $W_1 = U_2(1)^{\frac{1}{b}}$ et $S_1 = V_1 + W_1$. Si $S_1 \leq 1$, $X = \frac{V_1}{S_1}$. Sinon, pour tout $k \geq 2$, soit $V_k = U_1(k)^{\frac{1}{a}}$, $W_k = U_2(k)^{\frac{1}{b}}$ et $S_k = V_k + W_k$. Soit enfin $\tau = \inf\{n \geq 1 : S_k \leq 1\}$. Montrer que $X = \frac{V_\tau}{S_\tau}$ suit une loi $\text{Beta}(a, b)$. En déduire un algorithme de simulation d'une loi $\beta(a, b)$.

Exercice 2.11 Soit m un nombre réel fixé et X une variable aléatoire réelle de fonction de répartition F inversible; notons F^{-1} la fonction réciproque de F .

1. Écrire un algorithme de simulation de la loi de X conditionnellement à $X > m$ à l'aide de la méthode du rejet. Que se passe-t-il quand $m \rightarrow +\infty$?
2. Soit U une variable aléatoire de loi $\mathcal{U}([0, 1])$ et $Z = F^{-1}(F(m) + (1 - F(m))U)$. Calculer la densité de Z et en déduire une méthode de simulation de X conditionnellement à $X > m$. Comparer l'efficacité de cette méthode à celle du rejet.

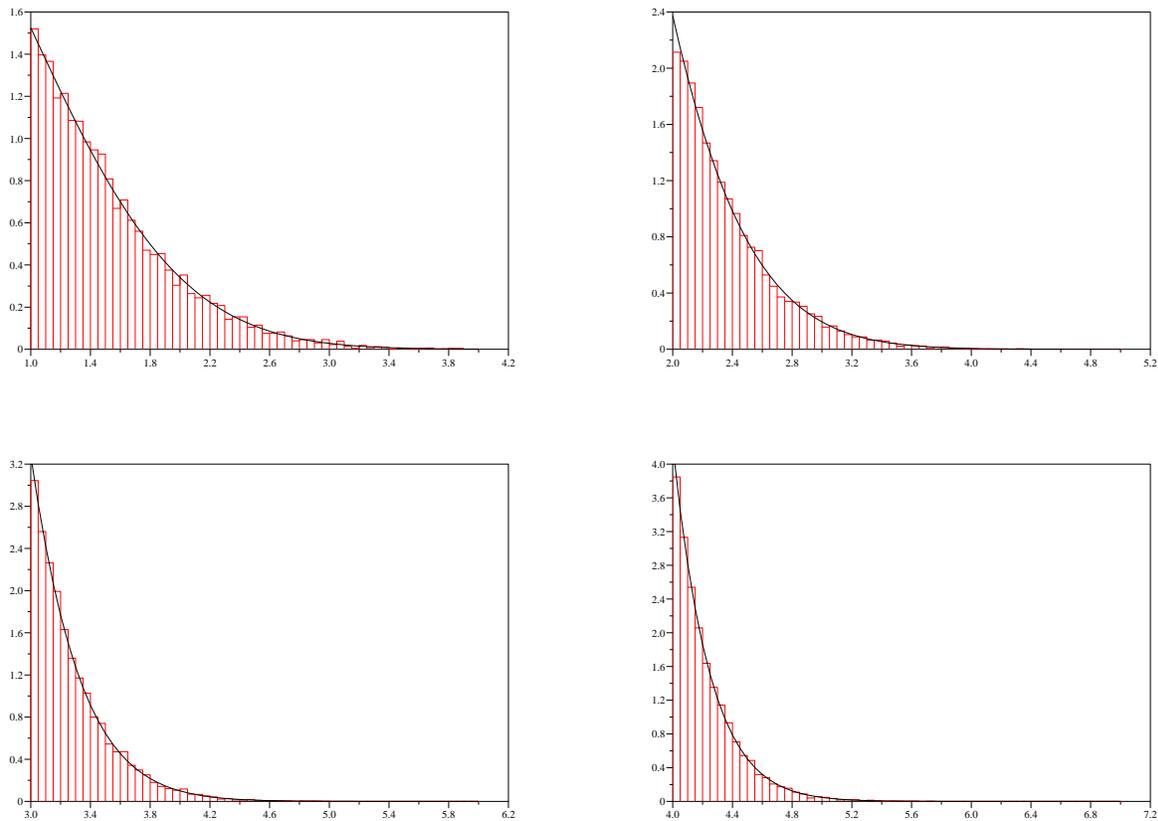
3. On cherche à simuler une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$ conditionnellement à $X > m$. Montrer que l'on peut se ramener au cas centré réduit $m = 0$ et $\sigma = 1$.
4. Proposer une méthode de rejet de la loi conditionnelle d'une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$ conditionnellement à $X > m$ basée sur la loi exponentielle translatée de densité $\theta \exp(-\theta(x - m))1_{\{x > m\}}$. Comment choisir le paramètre θ ?

Le tableau suivant donne une idée de la comparaison entre le temps de calcul et le nombre d'itérations nécessaires pour simuler 1000 valeurs de la loi conditionnelle de $X/\{X \geq m\}$ lorsque X est une variable gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ en utilisant la méthode de rejet directe de la question Q 1, la méthode de rejet basée sur la loi exponentielle de la question Q 4 et la technique de la question Q 2 basée sur la fonction de répartition. Le calcul de F et de F^{-1} est fait par la méthode numérique approximative décrite dans la section 2.4.

	m=1 Temps	m=2 Temps	m=3 Temps	m=4 Temps	m=1 Nombre	m=2 Nombre	m=3 Nombre	m=4 Nombre
Q 1	0.15	0.83	14.17	568.54	6.6×10^3	4.5×10^4	7.7×10^5	3.1×10^7
Q 4	0.15	0.44	4.72	144.22	2.4×10^3	8.7×10^3	10^5	3.4×10^6
Q 2	0.12	0.12	0.12	0.12	10^3	10^3	10^3	10^3

La figure suivante montre l'histogramme obtenu pour ces lois conditionnelles par la méthode de la question Q 2 pour 10 000 simulations et la densité théorique :

FIG. 7 – Histogrammes de la loi conditionnelle gaussienne X sachant $X \geq m$

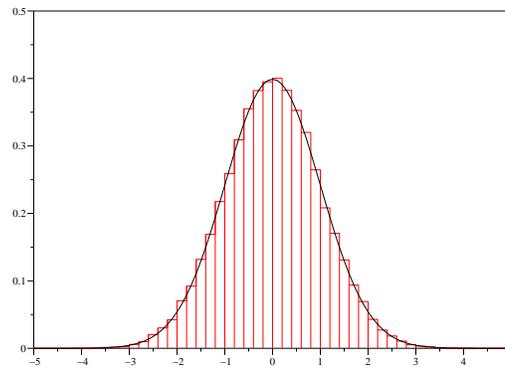


Exercice 2.12 On se propose de simuler par une méthode de rejet un échantillon de taille N de variables aléatoires gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ de densité f par rapport à la densité exponentielle symétrique de densité $g(x) = \frac{\lambda}{2} \exp(-\lambda |x|)$ où λ est une constante strictement positive.

1. Trouver le meilleur couple (λ, c) tel que $f \leq c g$.
2. Écrire un schéma de programme permettant de simuler un échantillon de taille N de loi $\mathcal{N}(0, 1)$ par cette méthode de rejet, qui fasse calculer le nombre moyen d'itérations nécessaires pour obtenir un tirage gaussien (et le comparer avec c), qui fasse calculer la moyenne et la variance empiriques de l'échantillon et qui trace enfin sur le même graphique l'histogramme de l'échantillon et la densité théorique.

Le tableau suivant donne les temps de calcul, nombre moyen d'itérations, moyenne et variance empiriques suivant les valeurs de N (quand $\lambda = 1$ et $c = 1.3154892$) et la figure trace l'histogramme correspondant à $N = 40\ 000$.

N	Temps	Itérations	Moy.	Var.
1 000	0.09	1.36	0.0373	1.0434
4 000	0.33	1.32	0.0058	0.95
10 000	0.81	1.31	0.0015	0.992
20 000	1.63	1.31	0.0033	1.006
40 000	3.27	1.32	0.0022	1.002

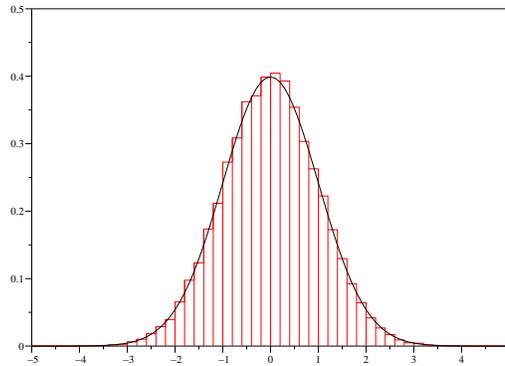


Exercice 2.13 Soit X et Y des variables aléatoires indépendantes de même loi exponentielle de paramètre 1.

1. Calculer la densité conditionnelle de X sachant $\{Y > (1 - X)^2/2\}$.
2. Soit Z une variable aléatoire suivant cette loi conditionnelle et S une variable aléatoire indépendante de Z et prenant les valeurs $+1$ et -1 avec probabilité $\frac{1}{2}$. Trouver la loi de SZ ?
3. En déduire une méthode de simulation d'une loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$.
4. Écrire un schéma de programme permettant de simuler un échantillon de taille N suivant cette méthode, qui fasse calculer le nombre moyen d'itérations nécessaires pour obtenir un tirage gaussien, qui fasse calculer la moyenne et la variance empiriques de l'échantillon et qui trace enfin sur le même graphique l'histogramme de l'échantillon et la densité théorique. Comparer cette méthode à celle de l'exercice précédent.

Le tableau suivant donne les mêmes informations que dans la méthode de rejet de l'exercice précédent.

N	Temps	Itérations	Moy.	Var.
1 000	0.08	1.279	- 0.0183	0.9518
4 000	0.32	1.32	- 0.0116	0.970
10 000	0.8	1.317	- 0.017	1.006
20 000	1.6	1.317	- 0.005	1.010
40 000	3.2	1.316	0.006	1.001



Pour la simulation d'un échantillon de taille 10^5 de loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ les temps de calcul et nombre d'appels au générateur de nombres pseudo aléatoire **Random** sont donnés dans le tableau suivant (suivant les méthodes utilisées ; Box-Muller1 et Polaire1 désignent les algorithmes correspondants dans lesquels on garde seulement un composante, Box-Muller2 et Polaire2 ceux où on garde les couples à chaque simulation, Rejet1 désigne la méthode de rejet de l'exercice précédent et Rejet2 celle de cet exercice) :

Méthode	Temps	Nombre
Box-Muller1	2.67	2×10^5
Box-Muller2	1.9	10^5
Polaire1	5	2.54×10^5
Polaire2	2.78	2.54×10^5
Rejet1	8.16	2.64×10^5
Rejet2	7.99	3.62×10^5

Que peut-on en conclure ?

3 Simulation de processus

3.1 Mouvement Brownien

Rappelons la définition et quelques propriétés du mouvement Brownien.

Définition 3.1 *Un processus stochastique $W : [0, +\infty[\times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est un mouvement Brownien (standard) si*

- (i) $W_0 = 0$.
- (ii) *Pour tout $s \leq t$, $W_t - W_s$ suit une loi gaussienne $\mathcal{N}(0, t - s)$.*
- (iii) *Pour tout $n \geq 1$ et tout $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_n$, les accroissements $(W_{t_{i+1}} - W_{t_i} : 0 \leq i \leq n - 1)$ sont indépendants.*

On en déduit immédiatement que pour tout instant $t \geq 0$, W_t suit une loi gaussienne $\mathcal{N}(0, t)$ et que pour tout couple d'instants $s, t \geq 0$,

$$E(W_s W_t) = \text{Cov}(W_s, W_t) = s \wedge t, \tag{3.1}$$

tandis que pour tout $T > 0$:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \sum_{i=0}^{n-1} (W_{\frac{(i+1)T}{n}} - W_{\frac{iT}{n}})^2 = T \quad \text{dans } L^2. \tag{3.2}$$

Les trajectoires de $(W_t, t \geq 0)$ sont presque sûrement continues, c'est à dire qu'il existe un ensemble négligeable N tel que pour tout $\omega \notin N$, la fonction $t \rightarrow W_t(\omega)$ est continue mais presque sûrement les trajectoires $t \rightarrow W_t(\omega)$ ne sont dérivables en aucun point. (On en fait le résultat plus précis suivant : presque sûrement les trajectoires de $(W_t, t \geq 0)$ sont Höldériennes d'ordre $\alpha < \frac{1}{2}$, mais ne sont pas Höldériennes d'ordre $\frac{1}{2}$.)

Le mouvement Brownien $(W_t, t \geq 0)$ est un processus à accroissements indépendants, (c'est la propriété (iii) de la Définition 3.1), stationnaires (c'est à dire que pour tout $s, t \geq 0$, les variables aléatoires $W_{s+t} - W_t$ et $W_s - W_0$ ont la même loi) et gaussien (c'est à dire que pour $0 \leq t_1 < \dots < t_n$, le vecteur $(W_{t_1}, \dots, W_{t_n})$ est gaussien). Il existe de très nombreuses caractérisations du mouvement Brownien ; nous en signalons deux :

Proposition 3.2 (i) *Soit $(X_t, t \geq 0)$ un processus continu, à accroissements indépendants stationnaires. Alors il existe des constantes r et σ telles que pour tout $t \geq 0$, $X_t - X_0 = r t + \sigma W_t$, où $(W_t, t \geq 0)$ est un mouvement Brownien.*

(ii) *Un processus gaussien centré continu $(X_t, t \geq 0)$ tel que $\text{Cov}(X_s, X_t) = s \wedge t$ est un mouvement Brownien.*

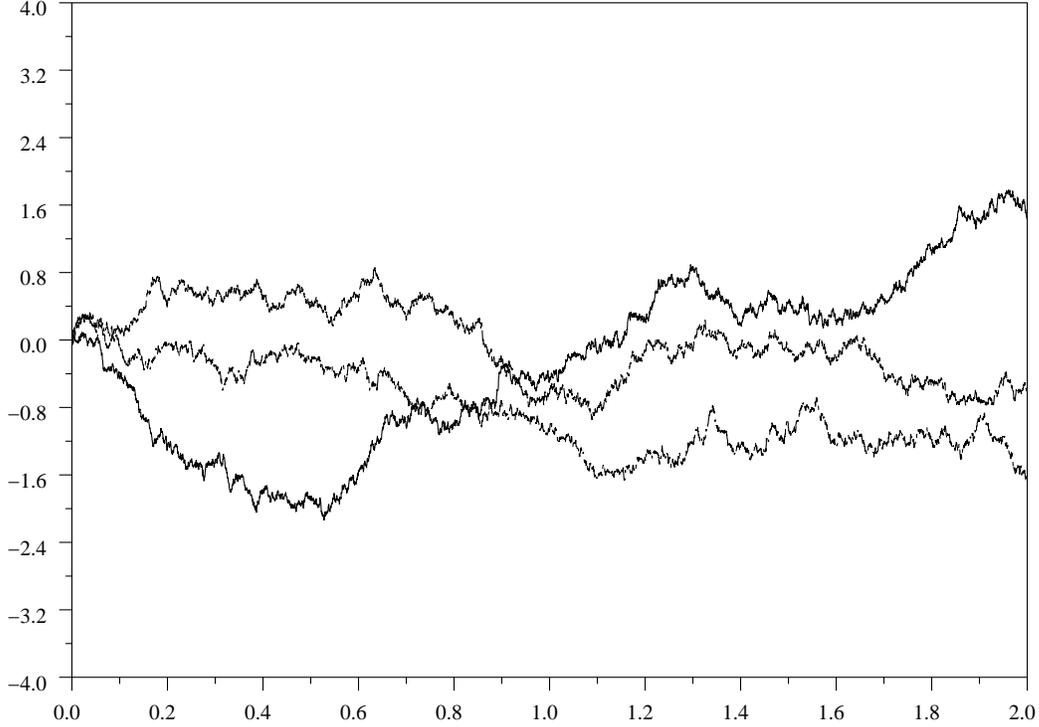
Nous allons donner deux méthodes de simulation des trajectoires d'un mouvement Brownien $(W_t, 0 \leq t \leq T)$ où $T > 0$ est fixé. Dans les algorithmes suivants, on désignera par **grand** la simulation d'une variable aléatoire $\mathcal{N}(0, 1)$ et chaque appel à **grand** fournit une réalisation d'une nouvelle variable aléatoire gaussienne réduite indépendante des précédentes (cf. Section 2.4).

La première méthode est directement inspirée par la définition. On choisit un entier $n \geq 1$ et un pas de discrétisation $h = \frac{T}{n}$. L'algorithme suivant :

```
ecart ← sqrt(T / n)
W[0] ← 0
Pour i=1 à n Faire
W[i] = W[i-1] + ecart * grand
```

fournit les valeurs d'une réalisation du processus aux points de la grille de discrétisation iT/n , $0 \leq i \leq n$, c'est à dire $\mathbf{W}[\mathbf{i}] = W_{\frac{iT}{n}}$. En interpolant linéairement entre les points $(\frac{iT}{n}, \mathbf{W}[\mathbf{i}])$, on obtient une approximation de la trajectoire de W entre les instants 0 et T grâce à la continuité p.s. des trajectoires de W . Voici un exemple de trois trajectoires obtenues pour $T = 1$ et $n = 6000$.

FIG. 8 – Simulation de trajectoires Browniennes



Cette méthode très simple a comme inconvénient que, si l'on souhaite raffiner la subdivision, les calculs doivent être tous refaits. Ceci est corrigé par la seconde méthode proposée.

L'idée de la seconde méthode est de calculer successivement les valeurs de W_T , $W_{T/2}$, $W_{T/4}$, $W_{3T/4}$, puis de W en des multiples dyadiques de T d'ordre $K + 1$ qui ne sont pas des multiples dyadiques de T d'ordre K . Pour mener à bien cette construction, pour $0 \leq s < t \leq T$, cherchons des constantes a et b telles que si on pose $Z_{a,b} = W_{\frac{s+t}{2}} - aW_s - bW_t$, la variable aléatoire $Z_{a,b}$ soit indépendante du couple (W_s, W_t) . Puisque le vecteur $(W_s, W_t, Z_{a,b})$ est gaussien, il suffit d'avoir $\text{Cov}(W_s, Z_{a,b}) = 0$ et $\text{Cov}(W_t, Z_{a,b}) = 0$, c'est à dire d'après (3.1

$$\begin{aligned} \text{Cov}(W_s, Z_{a,b}) &= s - a s - b s = 0, \\ \text{Cov}(W_t, Z_{a,b}) &= \frac{s+t}{2} - a s - b t = 0. \end{aligned}$$

Ces équations sont satisfaites pour tout $s < t$ si et seulement si $a = b = \frac{1}{2}$ et on voit par un calcul similaire que $Z_{a,b}$ indépendante de la tribu $\mathcal{G} = \sigma(W_u : u \leq s, u \geq t)$. Dans ce cas, la

variable aléatoire

$$Z = Z_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (W_{\frac{s+t}{2}} - W_s) - \frac{1}{2} (W_t - W_{\frac{s+t}{2}})$$

est gaussienne centrée de variance $\frac{1}{4} \frac{t-s}{2} + \frac{1}{4} \frac{t-s}{2} = \frac{t-s}{4}$. On en déduit que

$$\begin{cases} W_{\frac{s+t}{2}} = \frac{1}{2} [W_s + W_t + \sqrt{t-s} G], \\ G \text{ est une gaussienne } \mathcal{N}(0, 1) \text{ indépendante de } W_u, u \leq s, u \geq t. \end{cases} \quad (3.3)$$

Si $(G_n, n \geq 1)$ désigne une suite de variables aléatoires indépendantes $\mathcal{N}(0, 1)$, on en déduit la procédure suivante de simulation des $W_{i2^{-n}}$:

- 1) $W_1 = G_1$.
- 2) $W_{1/2} = \frac{1}{2} [W_1 + G_2]$ (on utilise (3.3) avec $s = 0$ et $t = 1$).
- 3) $W_{1/4} = \frac{1}{2} [W_{1/2} + \frac{1}{\sqrt{2}} G_3]$ (on utilise (3.3) avec $s = 0$ et $t = 1/2$),
 $W_{3/4} = \frac{1}{2} [W_{1/2} + W_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} G_4]$ (on utilise (3.3) avec $s = 1/2$ et $t = 1$).
- 4) Recommencer pour les points $\frac{2i-1}{2^k}$ avec $k = 2, \dots, n$.

On pourra écrire un programme utilisant cette construction des trajectoires de $(W_t, 0 \leq t \leq 1)$ en interpolant linéairement entre les points $(i2^{-n}, W_{i2^{-n}})$.

Rappelons la définition suivante de martingale.

Définition 3.3 Soit $(\mathcal{F}_t, t \geq 0)$ une filtration, c'est à dire une suite croissante de tribus et $(M_t, t \geq 0)$ un processus stochastique à valeurs dans \mathbb{R}^d . Le processus (M_t) est une (\mathcal{F}_t) martingale si :

- (i) M_t est \mathcal{F}_t mesurable pour tout $t \geq 0$.
- (ii) $E(|M_t|) < +\infty$ pour tout $t \geq 0$.
- (iii) Pour tout $0 \leq s \leq t < +\infty$, $E(M_t | \mathcal{F}_s) = M_s$.

La proposition suivante montre que le Brownien est une martingale pour sa filtration naturelle.

Proposition 3.4 Soit $(W_t, t \geq 0)$ un mouvement Brownien standard réel et pour tout $t \geq 0$ notons $\mathcal{F}_t = \sigma(W_s, 0 \leq s \leq t)$.

- (i) $(W_t, t \geq 0)$ est une (\mathcal{F}_t) martingale.
- (ii) $(W_t^2 - t, t \geq 0)$ est une (\mathcal{F}_t) martingale.
- (iii) Pour tout $\lambda > 0$, $(\exp(\lambda W_t - \frac{\lambda^2 t}{2}), t \geq 0)$ est une (\mathcal{F}_t) martingale.

Définition 3.5 Un Brownien standard r -dimensionnel est un processus $W : [0, +\infty[\times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^r$ tel que si $W_t = (W_t^1, \dots, W_t^r)$, les processus $(W_t^i, t \geq 0)$, $1 \leq i \leq r$ sont des Browniens standards réels indépendants.

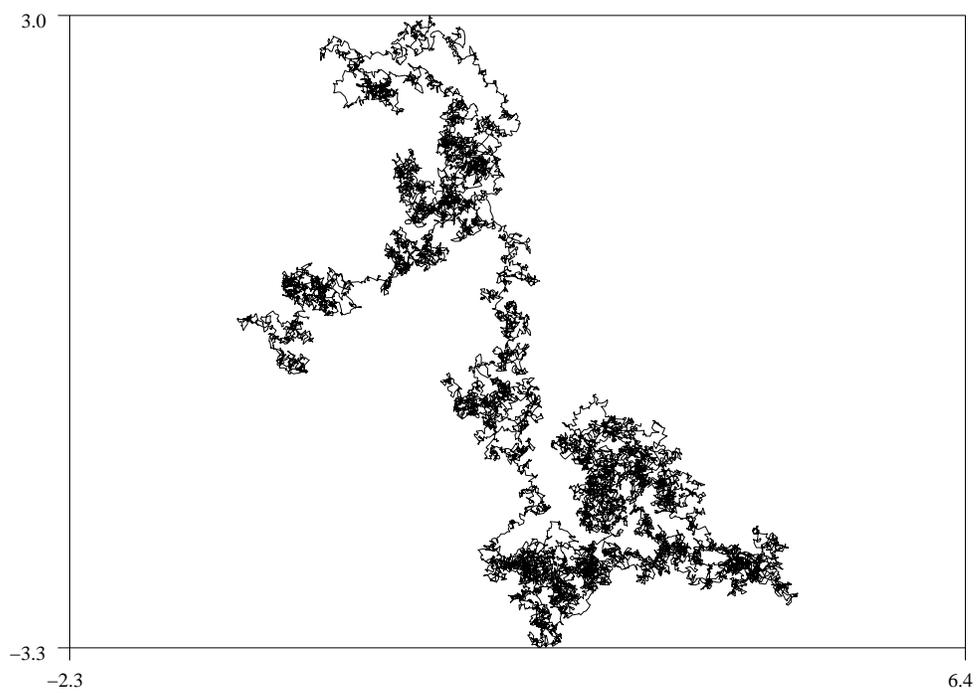
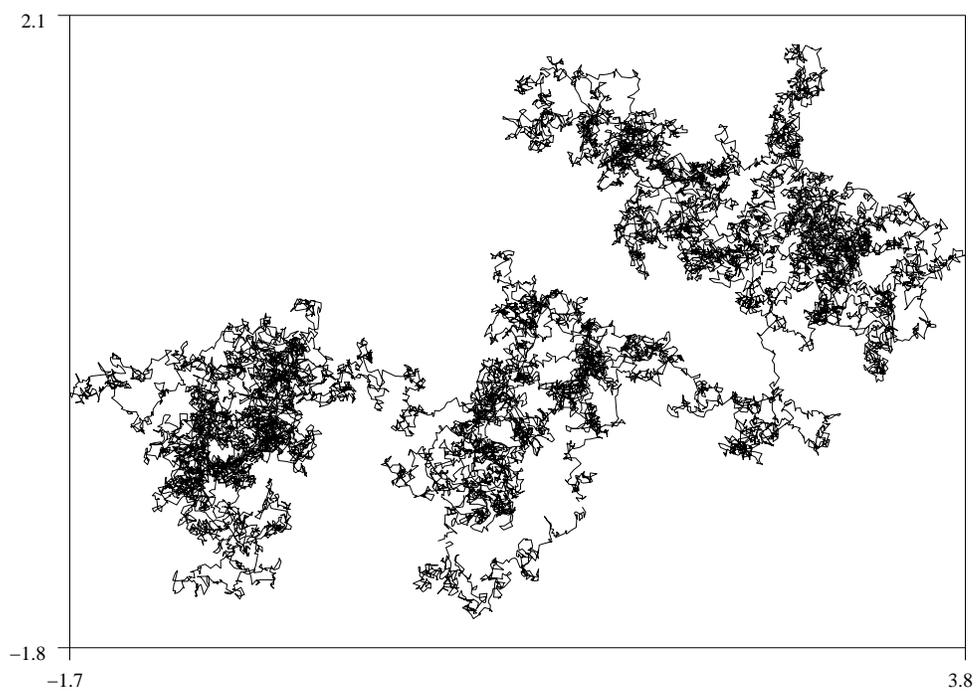
La première méthode d'interpolation sur la grille i/n , $0 \leq i \leq n$ proposée pour simuler un Brownien standard unidimensionnel sur l'intervalle $[0, 1]$ montre que si $(Y_i, i \geq 1)$ désigne une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi $\mathcal{N}(0, 1)$, et si pour tout $t \geq 0$ on note :

$$W_t^n = \sum_{i=1}^{[nt]} \frac{1}{\sqrt{n}} Y_i + (nt - [nt]) \frac{1}{\sqrt{n}} Y_{[nt]+1}$$

le processus W_t^n est celui qui est produit par la simulation et les lois des vecteurs $(W_{k/n}^n, k \geq 0)$ et $(W_{k/n}, k \geq 0)$ sont égales pour tout n .

Les figures suivantes montrent la simulation de deux trajectoires du mouvement Brownien dans \mathbb{R}^2 avec 2000 pas entre les instants 0 et 1 :

FIG. 9 – Simulation de deux trajectoires du Brownien dans le plan



Le théorème de la limite centrale permet d'étendre cette approximation du Brownien au-delà de sommes de gaussiennes indépendantes équidistribuées ; c'est le principe d'invariance de Donsker.

Théorème 3.6 (*Principe d'invariance de Donsker*) Soit $(Y_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi de carré intégrable, centrées de variance σ^2 . Pour tout $t \geq 0$ et tout $n \geq 1$ soit

$$X_t^n = \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{i=1}^{[nt]} Y_i + \frac{nt - [nt]}{\sigma \sqrt{n}} Y_{[nt]+1}. \quad (3.4)$$

Alors la suite des lois P_n de X_t^n sur la tribu des boréliens de $\mathcal{C}([0, +\infty[)$ converge faiblement vers une probabilité P telle que si $W_t(\omega) = \omega(t)$ désigne le processus canonique, $(W_t, t \geq 0)$ est un mouvement Brownien standard réel.

Démonstration : Nous ne donnons qu'un bref aperçu de la preuve.

Pour prouver la convergence de la suite (P_n) , il faut montrer sa tension. Ceci revient à prouver que pour tout $T > 0$ et $\varepsilon > 0$,

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_n P \left(\sup_{\substack{|t-s| \leq \delta \\ 0 \leq s, t \leq T}} |X_t^n - X_s^n| > \varepsilon \right) = 0.$$

Nous renvoyons le lecteur à [12], p. 62-71 pour une démonstration complète de ce résultat.

Il faut d'autre part montrer la convergence des lois fini-dimensionnelles, c'est à dire vérifier que pour tout $d \geq 1$, $0 < t_1 < \dots < t_d$, le vecteur $(X_{t_1}^n, \dots, X_{t_d}^n)$ converge en loi vers $(W_{t_1}, \dots, W_{t_d})$ quand $n \rightarrow +\infty$. Pour simplifier les notations, prenons $d = 2$, choisissons $0 < s < t$ et montrons que le couple (X_s^n, X_t^n) converge en loi vers (W_s, W_t) . Par définition de X^n , l'inégalité de Bienaymé-Chebychev montre que pour $S_k = \sum_{i=1}^k Y_i$:

$$P \left(\left| X_t^n - \frac{S_{[nt]}}{\sigma \sqrt{n}} \right| \geq \varepsilon \right) \leq P (|Y_{[nt]+1}| \geq \varepsilon \sigma \sqrt{n}) \leq \frac{C}{n}.$$

La suite $(X_s^n - \frac{S_{[ns]}}{\sigma \sqrt{n}}, X_t^n - \frac{S_{[nt]}}{\sigma \sqrt{n}})$ converge en probabilité, donc en loi, vers 0 et il suffit de montrer que la suite $(\frac{S_{[ns]}}{\sigma \sqrt{n}}, \frac{S_{[nt]}}{\sigma \sqrt{n}})$ converge en loi vers (W_s, W_t) , soit encore que la suite $(\frac{S_{[ns]}}{\sigma \sqrt{n}}, \frac{S_{[nt]} - S_{[ns]}}{\sigma \sqrt{n}})$ converge en loi vers $(W_s, W_t - W_s)$. Pour tout n , les variables aléatoires $S_{[ns]}$ et $S_{[nt]} - S_{[ns]}$ sont indépendantes et pour tout $u, v \in \mathbb{R}$, $n \geq 1$:

$$\begin{aligned} E \left[\exp \left(\frac{i u}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{j=1}^{[ns]} Y_j + \frac{i v}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{j=[ns]+1}^{[nt]} Y_j \right) \right] \\ = E \left[\exp \left(\frac{i u}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{j=1}^{[ns]} Y_j \right) \right] E \left[\exp \left(\frac{i v}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{j=[ns]+1}^{[nt]} Y_j \right) \right]. \end{aligned}$$

De plus, la suite $\left[\frac{1}{\sigma \sqrt{n}} - \frac{\sqrt{s}}{\sigma \sqrt{[ns]}} \right] \sum_{j=1}^{[ns]} Y_j$ converge vers 0 dans $L^2(P)$ (donc en loi) quand $n \rightarrow +\infty$ et le théorème de la limite centrale montre que la suite $\frac{\sqrt{s}}{\sigma \sqrt{[ns]}} \sum_{j=1}^{[ns]} Y_j$ converge en loi vers une gaussienne $\mathcal{N}(0, s)$, ce qui entraîne que

$$\lim_n \left[\exp \left(\frac{i u}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{j=1}^{[ns]} Y_j \right) \right] = e^{-\frac{u^2 s}{2}}.$$

Un raisonnement similaire sur $\frac{1}{\sigma\sqrt{n}} \sum_{j=[ns]+1}^{[nt]} Y_j$ conclut la démonstration. \square

On suppose que $(Y_n, n \geq 1)$ est une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi sur le réseau \mathbb{Z} (ou un réseau homothétique) et pour toute variable aléatoire Σ_0 sur \mathbb{Z} , on pose

$$\Sigma_{n+1} = \Sigma_n + Y_n .$$

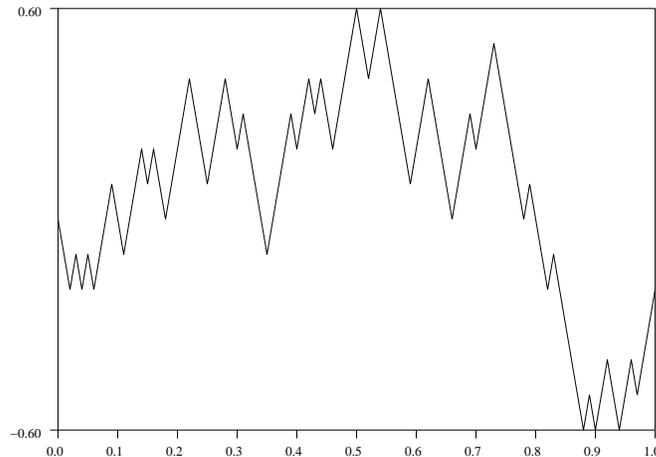
Une marche aléatoire symétrique unidimensionnelle de pas a est définie sur le réseau $a\mathbb{Z}$ par $P(Y_n = +a) = P(Y_n = -a) = \frac{1}{2}$. Soit $(\Sigma_n = (\Sigma_n^j, 1 \leq j \leq d), n \geq 1)$ un vecteur de \mathbb{R}^d formé de composantes $(\Sigma_n^j, n \geq 1), 1 \leq j \leq d$ qui sont des marches aléatoires symétriques indépendantes sur \mathbb{Z} de pas 1. Les variables aléatoires $Y_n^j = \Sigma_n^j - \Sigma_{n-1}^j$ sont donc indépendantes centrées de variance 1. D'après le principe d'invariance de Donsker, la suite de processus

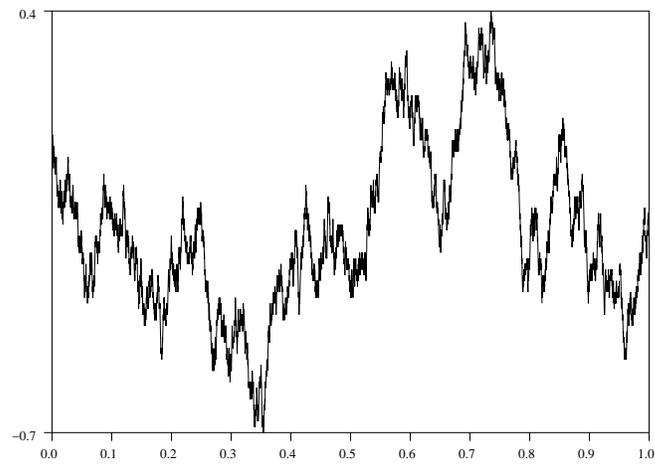
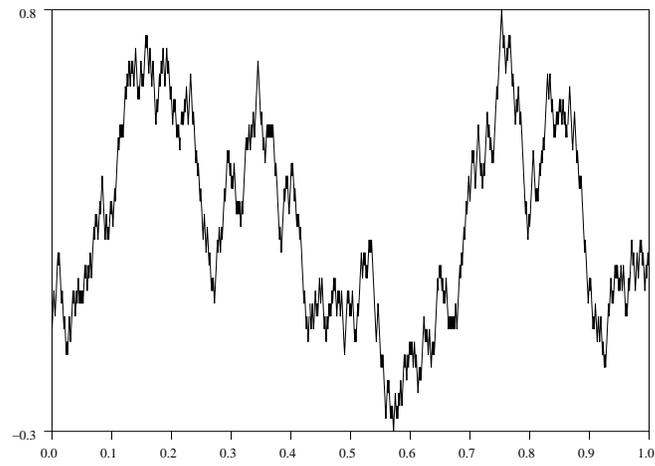
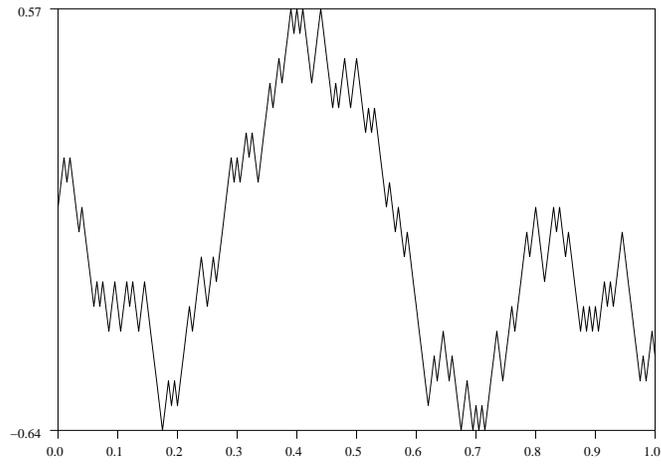
$$\tilde{W}_t^n = \sum_{i=1}^{[nt]} \frac{1}{\sqrt{n}} Y_i + \frac{(t - [nt])}{\sqrt{n}} Y_{[nt]+1} ,$$

qui sont les interpolés linéaires de $(\frac{1}{\sqrt{n}} \Sigma_{[n\cdot]}^j, 1 \leq j \leq d)$, converge en loi vers un Brownien standard de dimension d . En effet, chaque composante de \tilde{W}^n converge en loi vers un Brownien standard réel et l'indépendance des composantes est préservée par passage à la limite en loi. La suite \tilde{W}^n est aussi la suite des vecteurs d'interpolés linéaires de marches aléatoires indépendantes de pas $\frac{1}{\sqrt{n}}$.

Les figures suivantes montrent les simulations d'interpolés de marches aléatoires symétriques unidimensionnelles de pas $\frac{1}{\sqrt{N}}$ avec respectivement $N = 100, N = 200, N = 1\,000$ et $N = 5\,000$:

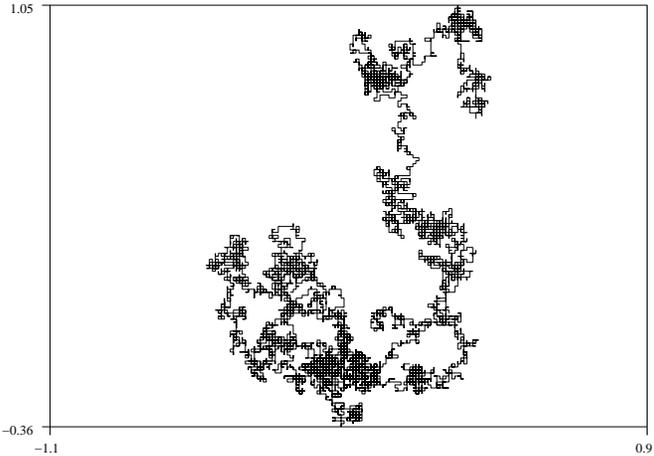
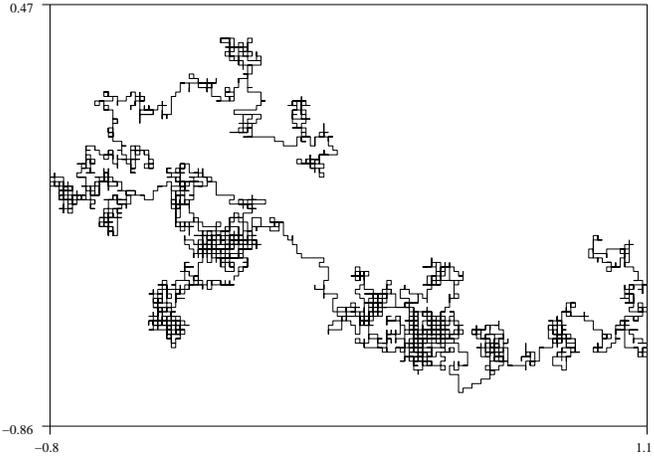
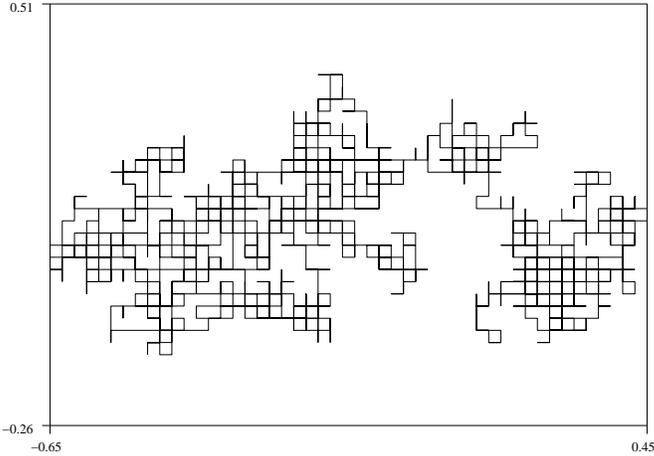
FIG. 10 – Simulation de marches aléatoires symétriques unidimensionnelles renormalisées





Les figures suivantes montrent les simulations de marches aléatoires symétriques bidimensionnelles de pas $\frac{1}{\sqrt{N}}$ avec respectivement $N = 2\,000$, $N = 5\,000$ et $N = 10\,000$.

FIG. 11 – Simulation de marche aléatoires symétriques renormalisées dans le plan



3.2 Intégrales stochastiques et diffusions

Dans toute cette section, nous noterons $(\mathcal{F}_t = \sigma(W_s, 0 \leq s \leq t),)$ la filtration d'un Brownien standard de dimension r .

Définition 3.7 (1) Fixons $T > 0$ et notons \mathcal{L}_T^2 l'ensemble des processus $X : [0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tels que :

(i) $X : [0, t] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est mesurable pour $\mathcal{B}[0, t] \otimes \mathcal{F}_t$ pour tout $t \in [0, T]$; X_t est donc \mathcal{F}_t -mesurable.

(ii) $\|X\|_{\mathcal{L}}^2 = \int_0^T E(|X_t|^2) dt < +\infty$

L'ensemble \mathcal{L}_T^2 muni de la norme $\|X\|_{\mathcal{L}}$ est un espace de Banach.

(2) Notons \mathcal{S}_T^2 l'ensemble des processus simples, c'est à dire des processus tels qu'il existe des instants $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_p = T$ et des variables aléatoires $(x_i, 1 \leq i \leq p)$ telles que x_i est \mathcal{F}_{t_i} -mesurable et de carré intégrable pour tout $i \in \{0, \dots, p-1\}$ et :

$$X_t = \sum_{i=0}^p x_i 1_{]t_i, t_{i+1}]}(t).$$

Alors \mathcal{S}_T^2 est un sous-ensemble dense de \mathcal{L}_T^2 .

On définit l'intégrale stochastique d'un processus simple $X_t = \sum_{i=0}^p x_i 1_{]t_i, t_{i+1}]}(t)$ par rapport à un mouvement Brownien standard de dimension 1 comme suit pour $t \in]t_k, t_{k+1}]$, $0 \leq k \leq p-1$:

$$\int_0^t X_s dW_s = \sum_{i=0}^{k-1} x_i (W_{t_{i+1}} - W_{t_i}) + x_k (W_t - W_{t_k}).$$

De plus on a l'isométrie suivante pour tout $X \in \mathcal{S}_T^2$:

$$E\left(\left|\int_0^t X_s dW_s\right|^2\right) = \int_0^t E(X_s^2) ds. \quad (3.5)$$

On en déduit que si une suite de processus simple $(X(n)_t, n \geq 1)$ converge vers $X \in \mathcal{L}_T^2$ pour la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{L}}$, alors la suite $(\int_0^t X(n)_s dW_s, n \geq 1)$ est de Cauchy dans $L^2(\Omega)$; on note de nouveau $\int_0^t X_s dW_s$ sa limite et l'isométrie (3.5) s'étend à $X \in \mathcal{L}_T^2$.

Enfin, si on note \mathcal{A}_T^2 l'ensemble des processus $X : [0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tels que la condition (i) de la définition 3.7 est satisfaite mais la condition (ii) est remplacée par :

(ii') $\int_0^T |X_t(\omega)|^2 dt < +\infty$ p.s. pour tout $t \in [0, T]$.

L'intégrale stochastique $\int_0^t X_s dW_s$ s'étend de façon unique à des processus $X \in \mathcal{A}_T^2$ et définit un processus $(\int_0^t X_s dW_s, t \in [0, T])$ qui est \mathcal{F}_t -adapté et presque sûrement continu. Cependant, pour $X \in \mathcal{L}_T^2$, le processus $(\int_0^t X_s dW_s, 0 \leq t \leq T)$ est une (\mathcal{F}_t) martingale, alors que cette propriété n'est plus nécessairement vraie si $X \in \mathcal{A}_T^2$.

Soit enfin $(W_t = (W_t^1, \dots, W_t^r), t \in [0, T])$ un Brownien standard de dimension r et $X = (X^{i,j}, 1 \leq i \leq d, 1 \leq j \leq r) : [0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{rd}$ un processus à valeurs dans \mathbb{R}^{rd} dont toutes les composantes $(X_t^{i,j}, t \in [0, T])$ appartiennent à \mathcal{A}_T^2 . Alors pour tout $t \in [0, T]$,

$$\int_0^T X_s dW_s = \left(\sum_{k=1}^r \int_0^t X_s^{i,k} dW_s^k, 1 \leq i \leq d \right) \in \mathbb{R}^d.$$

Si les composantes de X appartiennent à \mathcal{L}_T^2 , l'isométrie s'écrit pour tout $i \in \{1, \dots, d\}$ et $t \in [0, T]$:

$$E\left(\left|\sum_{k=1}^r \int_0^t X_s^{i,k} dW_s^k\right|^2\right) = \int_0^t \sum_{k=1}^r E(|X_s^{i,k}|^2) ds. \quad (3.6)$$

Rappelons enfin l'inégalité suivante de Burkholder-Davies-Gundy qui généralise l'isométrie à un espace L^p quelconque avec $p \in [2, +\infty[$:

Proposition 3.8 *Pour tout $p \in [1, +\infty[$ il existe une constante $C_p > 0$ telle que pour tout processus adapté de carré intégrable $X : [0, T] \otimes \Omega \rightarrow \mathbb{R}^r$:*

$$E\left(\sup_{0 \leq t \leq T} \left|\int_0^t \sum_{k=1}^r X_s^k dW_s^k\right|^{2p}\right) \leq C_p E\left(\left|\int_0^T \sum_{k=1}^r |X_s^k|^2 ds\right|^p\right).$$

Le résultat suivant assure l'existence et l'unicité de solutions fortes d'équations différentielles stochastiques (qui sont des processus de diffusion).

Théorème 3.9 *Soit W un Brownien standard de dimension r pour la filtration (\mathcal{F}_t) , $\sigma : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ et $b : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ des fonctions mesurables pour les tribus produit de boréliens pour lesquelles il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $t \in [0, T]$, $x, y \in \mathbb{R}^d$:*

(i) (condition de Lipschitz)

$$|\sigma(t, x) - \sigma(t, y)| + |b(t, x) - b(t, y)| \leq C|x - y|, \quad (3.7)$$

(ii) (restriction sur la croissance)

$$|\sigma(t, x)| + |b(t, x)| \leq C(1 + |x|). \quad (3.8)$$

Alors pour tout $x \in \mathbb{R}^d$ l'équation différentielle stochastique

$$X_t = x + \int_0^t \sigma(s, X_s) dW_s + \int_0^t b(s, X_s) ds \quad (3.9)$$

a une unique solution trajectorielle $(X_t, t \in [0, T])$ adaptée à la filtration (\mathcal{F}_t) à trajectoires presque sûrement continues, et telle que pour tout $p \in [1, +\infty[$ il existe une constante C_p telle que pour tout $h > 0$:

$$E\left(\sup_{t \in [0, T]} |X_t|^p\right) \leq C_p(1 + |x|^p), \quad (3.10)$$

$$\sup_{t \in [0, T]} E(|X_{t+h} - X_t|^{2p}) \leq C_p(1 + |x|^{2p})h^p. \quad (3.11)$$

Ce théorème est montré par exemple en utilisant un schéma de Picard, l'inégalité de Burkholder-Davies-Gundy, ainsi que le lemme de Gronwall :

Lemme 3.10 *Soit $\lambda, v : [0, +\infty[\rightarrow [0, +\infty[$ des fonctions telles que v est bornée et λ est continue, et soit $C > 0$ une constante telle que pour tout $t \in [0, T]$:*

$$v(t) \leq C + \int_0^t \lambda(s) v(s) ds.$$

Alors pour tout $t \in [0, T]$:

$$v(t) \leq C \exp\left(\int_0^t \lambda(s) ds\right).$$

Théorème 3.11 (Formule d'Itô) Soit σ et b des fonctions satisfaisant les conditions (3.7) et (3.8) du Théorème 3.9 et $f : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction $f(t, x)$ dérivable par rapport à t et deux fois différentiable par rapport à $x = (x_1, \dots, x_d)$ et dont les dérivées partielles sont continues ; alors

$$\begin{aligned} f(t, X_t) &= f(0, x) + \int_0^t \frac{\partial f}{\partial s}(s, X_s) ds + \sum_{i=1}^d \sum_{k=1}^r \int_0^t \frac{\partial f}{\partial x_i}(s, X_s) \sigma_k^i(s, X_s) dW_s^k \\ &+ \sum_{i=1}^d \int_0^t \frac{\partial f}{\partial x_i}(s, X_s) b^i(s, X_s) ds + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \int_0^t \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(s, X_s) (\sigma \sigma^*)^{i,j}(s, X_s) ds. \end{aligned} \quad (3.12)$$

3.3 Schéma d'Euler

Soit b et σ des coefficients qui satisfont les conditions (3.7) et (3.8) du Théorème 3.9, $n \in \mathbb{N}^*$ et pour tout entier $k \in \{0, \dots, n\}$, notons $t_k = \frac{kT}{n}$. Définissons par récurrence le processus X^n sur $[0, T]$ (schéma d'Euler de X de pas $h = T/n$) en posant :

$$X_0^n = x, \quad (3.13)$$

$$X_{t_{k+1}}^n = X_{t_k}^n + \sigma(t_k, X_{t_k}^n) (W_{t_{k+1}} - W_{t_k}) + b(t_k, X_{t_k}^n) (t_{k+1} - t_k), \quad \forall 0 \leq k < n. \quad (3.14)$$

Pour définir un processus pour tout $t \in [0, T]$, il y a deux façons classiques de procéder entre les instants t_k et t_{k+1} . Pour tout $t \in [0, T]$, notons $\phi_t^n = \left[\frac{nt}{T} \right] \frac{T}{n} = \max\{t_k : t_k \leq t\}$ et définissons le processus \bar{X}_t^n par $\bar{X}_t^n = X_{t_k}^n$ pour tout $k \in \{0, \dots, n-1\}$ et

$$\bar{X}_t^n = X_{t_k}^n + \int_{t_k}^t \sigma(t_k, X_{t_k}^n) dW_s + \int_{t_k}^t b(t_k, X_{t_k}^n) ds \quad \text{pour } t_k \leq t < t_{k+1}. \quad (3.15)$$

Alors le processus \bar{X}^n est solution de l'équation différentielle stochastique :

$$\bar{X}_t^n = x + \int_0^t \sigma(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) dW_s + \int_0^t b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) ds. \quad (3.16)$$

Si ce processus est agréable à manipuler d'un point de vue théorique, il n'est bien sûr pas « vraiment » simulable, sauf aux points t_k . D'un point de vue pratique, on lui préfère donc le processus $X^{(n)}$ interpolé linéaire de X^n entre les instants t_k et t_{k+1} , c'est à dire défini par $X_{t_k}^{(n)} = X_{t_k}^n$ pour tout $k \in \{0, \dots, n-1\}$ et par :

$$X_t^{(n)} = X_{t_k}^n + \frac{t - t_k}{t_{k+1} - t_k} (X_{t_{k+1}}^n - X_{t_k}^n) \quad \text{pour } t_k \leq t < t_{k+1}. \quad (3.17)$$

Ce processus n'est pas adapté, mais pour tout $k \in \{0, \dots, n\}$, $X_{t_k}^{(n)} = \bar{X}_{t_k}^n = X_{t_k}^n \in \mathcal{F}_{t_k}$ et :

$$X_{t_k}^n = x + \int_0^{t_k} \sum_{j=0}^{k-1} \sigma(t_j, X_{t_j}^n) 1_{[t_j, t_{j+1}[}(s) dW_s + \int_0^{t_k} \sum_{j=0}^{k-1} b(t_j, X_{t_j}^n) 1_{[t_j, t_{j+1}[}(s) ds.$$

Le lemme suivant fournit une majoration des moments de \bar{X}^n et de $X^{(n)}$.

Lemme 3.12 Pour tout $p \in [1, +\infty[$,

$$\sup_{n \geq 1} E \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |\bar{X}_t^n|^p + \sup_{0 \leq t \leq T} |X_t^{(n)}|^p \right) < +\infty. \quad (3.18)$$

Démonstration : Nous montrerons l'inégalité (3.18) pour \bar{X}^n et laissons l'autre démonstration en exercice.

Soit $p \in [1, +\infty[$; montrons tout d'abord que

$$E \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |\bar{X}_t^n|^{2p} \right) < +\infty, \quad \forall n \geq 1, \quad (3.19)$$

ce qui revient à prouver que pour tout $k = 0, \dots, n-1$, $E \left(\sup_{t \in [t_k, t_{k+1}]} |\bar{X}_t^n|^{2p} \right) < +\infty$. On le montre par récurrence sur k . En effet, l'indépendance de $X_{t_k}^n$ et de $W_t - W_{t_k}$ pour $t \in [t_k, t_{k+1}]$ prouve que pour $k = 0, \dots, n-1$,

$$\begin{aligned} E \left(\sup_{t \in [t_k, t_{k+1}]} |\bar{X}_t^n|^{2p} \right) &\leq 3^{2p-1} \left[E(|X_{t_k}^n|^{2p}) + E(|\sigma(t_k, X_{t_k}^n)|^{2p}) E \left(\sup_{t \in [t_k, t_{k+1}]} |W_t - W_{t_k}|^{2p} \right) \right. \\ &\quad \left. + E(|b(t_k, X_{t_k}^n)|^{2p})(t_{k+1} - t_k)^{2p} \right] \\ &\leq 3^{2p-1} \left[E(|X_{t_k}^n|^{2p}) + 2^{2p-1} C^{2p} (1 + E(|X_{t_k}^n|^{2p})) \left(\frac{2p}{2p-1} \right)^{2p} \left(\frac{T}{n} \right)^p \right. \\ &\quad \left. + 2^{2p-1} C^{2p} (1 + E(|X_{t_k}^n|^{2p})) \left(\frac{T}{n} \right)^{2p} \right]. \end{aligned}$$

Pour tout $t \in [0, T]$, d'après l'inégalité de Burkholder-Davies-Gundy (Proposition 3.8) :

$$E \left(\sup_{0 \leq s \leq t} |\bar{X}_s^n|^{2p} \right) \leq 3^{2p-1} \left[|x|^{2p} + C_p E \left(\left| \int_0^t \sigma^2(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) ds \right|^p \right) + E \left(\int_0^t |b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n)|^{2p} ds \right) \right].$$

Notons $Y_t^n = E \left(\sup_{0 \leq s \leq t} |\bar{X}_s^n|^{2p} \right)$; l'inégalité de Hölder par rapport à la mesure de Lebesgue sur $[0, t]$ avec les exposants conjugués p et $p/(p-1)$ (respectivement $2p$ et $2p/(2p-1)$), et la restriction sur la croissance (3.8) des coefficients entraînent que :

$$Y_t^n \leq C_p \left[|x|^{2p} + t^{p-1} \int_0^t C (1 + Y_s^n) ds + t^{2p-1} \int_0^t C (1 + Y_s^n) ds \right];$$

où les constantes C et C_p sont indépendantes de n . Nous avons montré dans (3.19) que pour tout entier n la fonction Y^n est bornée et le lemme de Gronwall permet alors de conclure que $\sup_n Y_T^n \leq C_p (1 + |x|^{2p})$. \square

Les figures 12 et 13 donnent la simulation des trajectoires de $(X^{(n)}(t), t \in [0, 2])$ avec $n = 5000$ pour les deux diffusions suivantes de Black et Sholes avec une volatilité égale à 1 pour la première figure :

$$X_t = 1 + \int_0^t X_s dW_s + \int_0^t X_s ds \quad (\text{courbe « supérieure »})$$

$$X_t = 1 + \int_0^t X_s dW_s - \int_0^t X_s ds \quad (\text{courbe « inférieure »})$$

et à 0.5 pour la seconde figure :

$$X_t = 1 + \int_0^t 0.5 X_s dW_s + \int_0^t X_s ds \quad (\text{courbe « supérieure »})$$

$$X_t = 1 + \int_0^t 0.5 X_s dW_s - \int_0^t X_s ds \quad (\text{courbe « inférieure »}).$$

FIG. 12 – Simulation de deux trajectoires de diffusion avec $\sigma(x) = (x + 1)$ et $b(x) = \pm(x + 1)$ puis avec $\sigma(x) = 0.5(x + 1)$ et $b(x) = \pm(x + 1)$

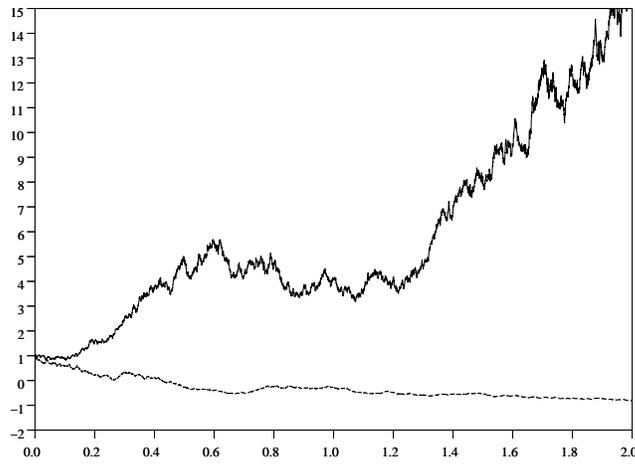
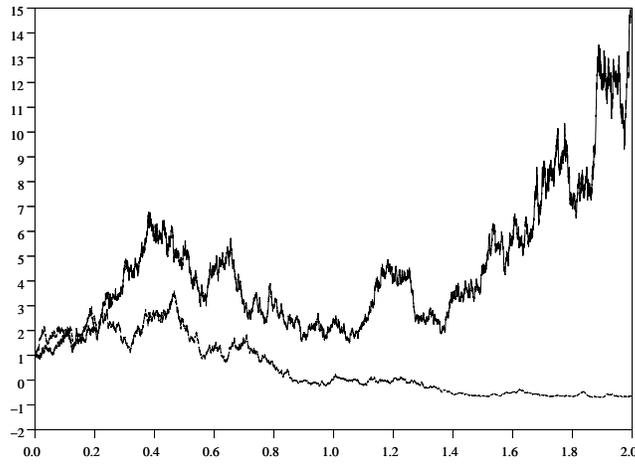
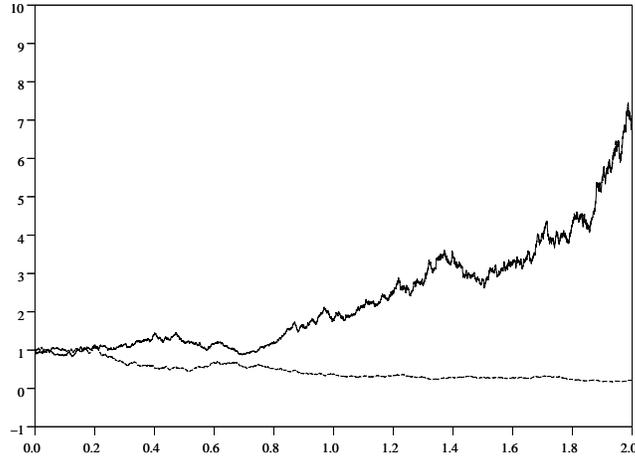
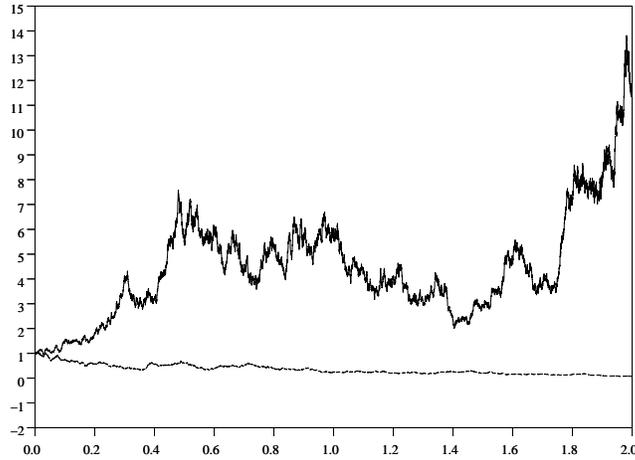


FIG. 13 – Simulation de deux trajectoires de processus de Black et Sholes avec $\sigma(x) = x$ et $b(x) = \pm x$ puis avec $\sigma(x) = 0.5x$ et $b(x) = \pm x$



Pour établir la convergence de \bar{X}^n vers X , écrivons l'expression explicite de $\bar{X}_t^n - X_t$:

$$\bar{X}_t^n - X_t = \int_0^t [\sigma(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - \sigma(s, X_s)] dW_s + \int_0^{t_k} [b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - b(s, X_s)] ds .$$

Clairement la propriété de Lipschitz des coefficients doit être renforcée pour évaluer par exemple $b(t, x) - b(s, x)$. Nous introduisons la propriété de Hölder suivante sur les coefficients σ et b ; il existe $\alpha > 0$ tel que pour tout $0 \leq s \leq t \leq T$ et $x \in \mathbb{R}^d$:

$$|\sigma(t, x) - \sigma(s, x)| + |b(t, x) - b(s, x)| \leq C(1 + |x|) |t - s|^\alpha . \quad (3.20)$$

Cette condition est trivialement vérifiée avec α arbitraire si les coefficients ne dépendent pas de t . Le théorème suivant fournit la vitesse d'approximation « forte » du schéma d'Euler :

Théorème 3.13 Soit W un mouvement Brownien standard à valeurs dans \mathbb{R}^r , σ et b des coefficients vérifiant les conditions (3.7), (3.8) et (3.20) avec $\alpha \geq \frac{1}{2}$. Alors pour tout $p \in [1, +\infty[$:

$$E \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |\bar{X}_t^n - X_t|^{2p} \right) \leq C_p n^{-p}. \quad (3.21)$$

$$\sup_{0 \leq t \leq T} E \left(|X_t^{(n)} - X_t|^{2p} \right) + E \left(\sup_{0 \leq k \leq n} |X_{\frac{kT}{n}}^{(n)} - X_{\frac{kT}{n}}|^{2p} \right) \leq C_p n^{-p}. \quad (3.22)$$

D'autre part pour tout $\beta < \frac{1}{2}$ on a presque sûrement :

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} n^\beta \sup_{0 \leq t \leq T} [|\bar{X}_t^n - X_t| + |X_t^{(n)} - X_t|] = 0. \quad (3.23)$$

Démonstration : Pour tout t notons $Z_t = \sup_{0 \leq s \leq t} |\bar{X}_s^n - X_s|$. D'après (3.19) et (3.10), $\sup_{t \leq T} E(Z_t^{2p}) = E(Z_T^{2p}) < +\infty$ pour tout $p \in [1, +\infty[$. Les inégalités de Burkholder-Davies-Gundy et de Hölder entraînent que pour tout $p \in [1, +\infty[$ et $t \in [0, T]$,

$$\begin{aligned} E(Z_t^{2p}) &\leq C_p E \left(\left| \int_0^t |\sigma(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - \sigma(s, X_s)|^2 ds \right|^p \right) \\ &\quad + C_p E \left(\int_0^t |b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - b(s, X_s)|^{2p} ds \right) \\ &\leq C_p t^{p-1} \int_0^t E \left(|\sigma(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - \sigma(s, X_s)|^{2p} \right) ds \\ &\quad + C_p t^{2p-1} \int_0^t E \left(|b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - b(s, X_s)|^{2p} \right) ds. \end{aligned}$$

De plus les inégalités (3.7) et (3.20) entraînent que pour $h = T/n$,

$$\begin{aligned} |b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - b(s, X_s)| &\leq |b(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - b(\phi_s^n, X_{\phi_s^n})| + |b(\phi_s^n, X_{\phi_s^n}) - b(s, X_{\phi_s^n})| \\ &\quad + |b(s, X_{\phi_s^n}) - b(s, X_s)| \\ &\leq C_T [|\bar{X}_{\phi_s^n}^n - X_s| + h^\alpha (1 + |X_{\phi_s^n}|) + |X_{\phi_s^n} - X_s|]. \end{aligned}$$

Une inégalité similaire pour la différence $|\sigma(\phi_s^n, \bar{X}_{\phi_s^n}^n) - \sigma(s, X_s)|$, les inégalités (3.10) et (3.11) entraînent que

$$E(Z_t^{2p}) \leq C_{p,T} \left[\int_0^t E(Z_s^{2p}) ds + h^{2\alpha p} + h^p \right].$$

L'inégalité (3.18) et le lemme de Gronwall permettent d'en déduire (3.21). D'autre part, $\bar{X}_{t_k}^n = X_{t_k}^{(n)}$ pour tout $k \in \{0, \dots, n\}$. Puisque $X^{(n)}$ est l'interpolé linéaire de \bar{X}^n , $\sup_{0 \leq t \leq T} E(|X_t^{(n)} - X_t|^{2p}) \leq C_p \sum_{i=1}^3 A_i$, où

$$\begin{aligned} A_1 &= E \left(\sup_{0 \leq k \leq n} |\bar{X}_{t_k}^n - X_{t_k}|^{2p} \right), \\ A_2 &= \sup_{0 \leq k \leq n-1} E \left(\sup_{t_k \leq t \leq t_{k+1}} |X_t - X_{t_k}|^{2p} \right), \\ A_3 &= \sup_{0 \leq k \leq n-1} E \left(|\bar{X}_{t_{k+1}}^n - \bar{X}_{t_k}^n|^{2p} \right). \end{aligned}$$

L'inégalité (3.21) montre que $A_1 \leq C_p n^{-p}$. L'inégalité (3.11) montre que $A_2 \leq C_p n^{-p}$. Enfin $A_3 \leq C_p (A_1 + A_2)$, ce qui termine la démonstration de (3.21). La convergence presque sûre est laissée en exercice. \square

Le théorème précédent montre que la vitesse de convergence « forte » du schéma d'Euler est $1/2$. Nous montrerons plus loin (section 4.3) que sa vitesse de convergence « faible » est 1 , c'est à dire que nous établirons que $|E(f(X_T^{(n)})) - E(f(X_T))| \leq C n^{-1}$ pour une fonction borélienne f convenable.

3.4 Schéma de Milstein

La « mauvaise » vitesse de convergence forte du schéma d'Euler est due à l'intégrale stochastique pour laquelle la majoration des moments de $\int_0^t [\sigma(s, X_s) - \sigma(\phi_s^n, X_{\phi_s^n})] dW_s$ utilisant seulement le caractère Lipschitzien des coefficients et (3.11) est « grossière ». Une idée naturelle consiste à utiliser une formule de Taylor de σ à l'ordre 1 ; pour la présenter, supposons que $r = d = 1$ et que les coefficients σ, b ne dépendent que de x ; alors pour $t_k \leq s < t_{k+1}$ et σ assez régulière :

$$\begin{aligned} \sigma(X_s) &= \sigma \left(X_{t_k} + \int_{t_k}^s \sigma(X_u) dW_u + \int_{t_k}^s b(X_u) du \right) \\ &\sim \sigma \left(X_{t_k} + \sigma(X_{t_k}) (W_s - W_{t_k}) + b(X_{t_k}) (s - t_k) \right) \\ &\sim \sigma(X_{t_k}) + \sigma'(X_{t_k}) \sigma(X_{t_k}) (W_s - W_{t_k}) ; \end{aligned}$$

en effet, d'après l'isométrie (3.5) ou l'inégalité de Burkholder-Davies-Gundy 3.8, les normes L^p du carré de l'accroissement du Brownien $(W_s - W_{t_k})^2$ sont du même ordre que l'accroissement de temps $s - t_k$. Enfin la formule d'Itô appliquée à $(W_s - W_{t_k})^2$ montre que

$$(W_{t_{k+1}} - W_{t_k})^2 = 2 \int_{t_k}^{t_{k+1}} (W_s - W_{t_k}) dW_s + \int_{t_k}^{t_{k+1}} ds ;$$

on en déduit que

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \sigma(X_s) dW_s \sim \sigma(X_{t_k}) (W_{t_{k+1}} - W_{t_k}) + \frac{1}{2} \sigma'(X_{t_k}) \sigma(X_{t_k}) \left[(W_{t_{k+1}} - W_{t_k})^2 - \frac{T}{n} \right].$$

Ceci conduit au schéma suivant en dimension $r = d = 1$ (en notant $\sigma'_x(t, x)$ la dérivée partielle de σ par rapport à x) :

$$\begin{aligned} \tilde{X}_0^n &= x \\ \tilde{X}_{t_{k+1}}^n &= \tilde{X}_{t_k}^n + \sigma(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) (W_{t_{k+1}} - W_{t_k}) + \frac{1}{2} (\sigma'_x \sigma)(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) \left[(W_{t_{k+1}} - W_{t_k})^2 - \frac{T}{n} \right] \\ &\quad + b(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) \frac{T}{n} \quad \text{pour } 0 \leq k < n. \end{aligned} \tag{3.24}$$

Dans le cas vectoriel, un raisonnement similaire conduit au schéma suivant (dans lequel il faut en général laisser l'intégrale stochastique double) :

$$\begin{aligned} \tilde{X}_0^n &= x \\ \tilde{X}_{t_{k+1}}^n &= \tilde{X}_{t_k}^n + \sigma(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) (W_{t_{k+1}} - W_{t_k}) + \sum_{j,l=1}^r (\nabla \cdot \sigma_j \sigma_l^\bullet)(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) \int_{t_k}^{t_{k+1}} (W_s^j - W_{t_k}^j) dW_s^l \\ &\quad + b(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) \frac{T}{n} \quad \text{pour } 0 \leq k < n. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Il est pratiquement très difficile de simuler l'intégrale double en dimension quelconque sans hypothèse supplémentaire. Lorsque $r \geq 2$, on utilise ce schéma sous l'hypothèse de commutativité :

$$\nabla_{\bullet} \sigma_j \sigma_l^{\bullet} = \nabla_{\bullet} \sigma_l \sigma_j^{\bullet}, \quad \forall j, l \in \{1, \dots, r\}; \quad (3.26)$$

en effet dans le cas le schéma prend la forme suivante (qui n'utilise que des accroissements des composantes du Brownien, comme en dimension $r = 1$) :

$$\begin{aligned} \tilde{X}_0^n &= x \\ \tilde{X}_{t_{k+1}}^n &= \tilde{X}_{t_k}^n + \sigma(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) (W_{t_{k+1}} - W_{t_k}) + b(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) \frac{T}{n} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^r (\nabla_{\bullet} \sigma_j \sigma_l^{\bullet})(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) (W_{t_{k+1}}^j - W_{t_k}^j) (W_{t_{k+1}}^l - W_{t_k}^l) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^r (\nabla_{\bullet} \sigma_j \sigma_j^{\bullet})(t_k, \tilde{X}_{t_k}^n) \frac{T}{n} \quad \text{pour } 0 \leq k < n. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Le théorème suivant donne la vitesse de convergence forte de ce schéma :

Théorème 3.14 *Soit $\sigma : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{dr}$ et $b : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ des fonctions de classe \mathcal{C}^1 par rapport à t et de classe \mathcal{C}^2 par rapport à x , telles que les dérivées partielles d'ordre 1 et 2 de ces fonctions soient bornées. Soit X la diffusion solution de (3.9) et \tilde{X}^n le schéma de Milstein défini par (3.25) (c'est à dire par (3.24) si $r = 1$ ou (3.27) sous l'hypothèse de commutation (3.26)); alors pour tout $p \in [1, +\infty[$ il existe une constante $C_p > 0$ telle que :*

$$E \left(\sup_{0 \leq k \leq n} |X_{t_k} - \tilde{X}_{t_k}^n|^p \right) \leq C_p n^{-p}. \quad (3.28)$$

De plus pour tout $\beta \in]0, 1[$, $\lim_n n^\beta \sup_{0 \leq k \leq n} |X_{t_k} - \tilde{X}_{t_k}^n| = 0$ p.s.

Démonstration : Pour dégager les idées, nous supposons $r = d = 1$ et que les fonctions b et σ ne dépendent que de x et sont de classe \mathcal{C}^2 ; la démonstration dans le cas général est laissée en exercice. Remarquons tout d'abord que si pour tout $t \in [0, T]$ on pose,

$$\tilde{X}_t^n = x + \int_0^t \sigma(\tilde{X}_{\phi_s^n}^n) dW_s + \int_0^t \int_{\phi_s^n}^s (\sigma' \sigma)(\tilde{X}_{\phi_s^n}^n) dW_u dW_s + \int_0^t b(\tilde{X}_{\phi_s^n}^n) ds,$$

le processus \tilde{X}^n prend les valeurs imposées par (3.25) aux points t_k ; de plus, un raisonnement similaire à celui fait pour prouver (3.18) montre que

$$\sup_{n \geq 1} E \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |\tilde{X}_t^n|^p \right) < +\infty \quad (3.29)$$

Fixons $p \in [2, +\infty[$ et notons $h = \frac{T}{n}$ le pas de discrétisation; alors pour tout $t \in [0, T]$:

$$\begin{aligned} X_t - \tilde{X}_t^n &= \int_0^t [\sigma(X_{\phi_s^n}) - \sigma(\tilde{X}_{\phi_s^n}^n)] dW_s + \int_0^t [b(X_{\phi_s^n}) - b(\tilde{X}_{\phi_s^n}^n)] ds \\ &\quad + \int_0^t \int_{\phi_s^n}^s [(\sigma' \sigma)(X_{\phi_s^n}) - (\sigma' \sigma)(\tilde{X}_{\phi_s^n}^n)] dW_u dW_s + \int_0^t [\sigma(X_s) - \sigma(X_{\phi_s^n})] dW_s \\ &\quad - \int_0^t \int_{\phi_s^n}^s (\sigma' \sigma)(X_{\phi_s^n}) dW_u dW_s + \int_0^t [b(X_s) - b(X_{\phi_s^n})] ds. \end{aligned}$$

En utilisant la formule d'Itô pour $\sigma(X_t)$ et $b(X_t)$, on obtient

$$\begin{aligned}\sigma(X_s) - \sigma(X_{\phi_s^n}) &= \int_{\phi_s^n}^s (\sigma' \sigma)(X_u) dW_u + \int_{\phi_s^n}^s \left(\sigma' b + \frac{1}{2} \sigma'' \sigma^2 \right) (X_u) du \\ b(X_s) - b(X_{\phi_s^n}) &= \int_{\phi_s^n}^s (b' \sigma)(X_u) dW_u + \int_{\phi_s^n}^s \left(b' b + \frac{1}{2} b'' \sigma^2 \right) (X_u) du\end{aligned}$$

Notons $Z_t = \sup_{0 \leq s \leq t} |X_s - \tilde{X}_s^n|$ pour tout $t \in [0, T]$; alors :

$$\begin{aligned}E(|Z_t|^{2p}) &\leq C_p E \left(\sup_{0 \leq s \leq t} \left| \int_0^s [\sigma(X_{\phi_u^n}) - \sigma(\tilde{X}_{\phi_u^n}^n)] dW_u \right|^{2p} \right) \\ &+ C_p E \left(\sup_{0 \leq s \leq t} \left| \int_0^s [b(X_{\phi_u^n}) - b(\tilde{X}_{\phi_u^n}^n)] du \right|^{2p} \right) \\ &+ C_p E \left(\sup_{0 \leq s \leq t} \left| \int_0^s \int_{\phi_u^n}^u [(\sigma' \sigma)(X_{\phi_u^n}) - (\sigma' \sigma)(\tilde{X}_{\phi_u^n}^n)] dW_v dW_u \right|^{2p} \right) + C_p \sum_{i=1}^5 R_i(t),\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}R_1(t) &= E \left(\sup_{0 \leq s' \leq t} \left| \int_0^{s'} \int_{\phi_s^n}^s [(\sigma' \sigma)(X_u) - (\sigma' \sigma)(X_{\phi_s^n})] dW_u dW_s \right|^{2p} \right), \\ R_2(t) &= E \left(\sup_{0 \leq s' \leq t} \left| \int_0^{s'} \int_{\phi_s^n}^s \left(\sigma' b + \frac{1}{2} \sigma'' \sigma^2 \right) (X_u) du dW_s \right|^{2p} \right), \\ R_3(t) &= E \left(\sup_{0 \leq s' \leq t} \left| \int_0^{s'} \int_{\phi_s^n}^s (b' \sigma)(X_{\phi_s^n}) dW_u ds \right|^{2p} \right), \\ R_4(t) &= E \left(\sup_{0 \leq s' \leq t} \left| \int_0^{s'} \int_{\phi_s^n}^s [(b' \sigma)(X_u) - (b' \sigma)(X_{\phi_s^n})] dW_u ds \right|^{2p} \right), \\ R_5(t) &= E \left(\sup_{0 \leq s' \leq t} \left| \int_0^{s'} \int_{\phi_s^n}^s \left(b' b + \frac{1}{2} b'' \sigma^2 \right) (X_u) du ds \right|^{2p} \right).\end{aligned}$$

Puisque les fonctions b , σ et $(\sigma' \sigma)$ sont Lipschitziennes, les inégalités de Burkholder-Davies-Gundy (Proposition 3.8) et de Hölder par rapport à la mesure de Lebesgue entraînent que pour tout $p \in [1, +\infty[$:

$$\begin{aligned}E(|Z_t|^{2p}) &\leq C_p t^{p-1} \int_0^t E(|Z_s|^{2p}) ds + C_p t^{2p-1} \int_0^t E(|Z_s|^{2p}) ds \\ &+ C_p t^{p-1} \int_0^t E(|Z_s|^{2p}) h^p ds + C_p \sum_{i=1}^5 R_i(t),\end{aligned}$$

et que

$$\begin{aligned}
R_1(t) &\leq C_p t^{p-1} \int_0^t (s - \phi_s^n)^{p-1} \int_{\phi_s^n}^s E(|X_u - X_{\phi_s^n}|^{2p}) du ds, \\
R_2(t) &\leq C_p t^{p-1} \int_0^t (s - \phi_s^n)^{2p-1} \int_{\phi_s^n}^s [1 + E(|X_u|^{2p})] du ds, \\
R_4(t) &\leq C_p t^{2p-1} \int_0^t (s - \phi_s^n)^{p-1} \int_{\phi_s^n}^s E(|X_u - X_{\phi_s^n}|^{2p}) du ds, \\
R_5(t) &\leq C_p t^{2p-1} \int_0^t (s - \phi_s^n)^{2p-1} \int_{\phi_s^n}^s [1 + E(|X_u|^{2p})] du ds.
\end{aligned}$$

Enfin le théorème de Fubini stochastique entraîne que

$$\begin{aligned}
R_3(t) &= E \left(\sup_{0 \leq s' \leq t} \left| \int_0^{s'} \left(\int_u^{(\phi_u^n + h) \wedge s'} ds \right) (b' \sigma)(X_{\phi_u^n}) dW_u \right|^{2p} \right) \\
&\leq C_p h^{2p} t^{p-1} \int_0^t [1 + \sup_{0 \leq v \leq u} E(|X_v|^{2p})] du.
\end{aligned}$$

Les inégalités (3.10) et (3.11) montrent que

$$\sum_{i=1}^5 R_i(t) \leq C_{p,T} h^{2p}.$$

Le lemme de Gronwall permet d'en déduire

$$E \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |X_t - \tilde{X}_t^n|^{2p} \right) \leq C_{p,T} h^{2p},$$

ce qui entraîne (3.28). \square

Le schéma de Milstein est plus lent à simuler que celui d'Euler (en dimension $r > 1$, il faut évaluer beaucoup plus de fonctions aux points t_k) et, même si sa convergence forte est plus rapide, il est pratiquement moins utilisé que le schéma d'Euler.

Il est clair qu'en poursuivant les développements de Taylor de σ et b et en jouant sur la formule d'Itô, on peut espérer construire des schémas d'ordre strictement supérieur à 1. Cependant, ils font intervenir des intégrales stochastiques multiples et sont pratiquement difficilement exploitables (cf. [13] pour une théorie générale de ces approximations de Taylor).

3.5 Processus de Poisson.

Définition 3.15 *Un processus de Poisson $(N_t, t \geq 0)$ d'intensité $\lambda > 0$ est un processus stochastique $N : [0, +\infty[\times \Omega \rightarrow \mathbb{N}$ tel que :*

- (i) $N_0 = 0$.
- (ii) Pour $0 \leq s \leq t$, $N_t - N_s$ suit une loi de Poisson de paramètre $\lambda(t - s)$.
- (iii) Pour tout choix d'instants $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_k$, $k \geq 2$, les variables aléatoires $N_{t_{i+1}} - N_{t_i}$, $0 \leq i < k$ sont indépendantes.

Le processus de Poisson (N_t) est donc, comme le mouvement Brownien, un processus à accroissements indépendants et stationnaires.

Le théorème suivant, dont la démonstration classique est laissée en exercice, permet de construire et simuler un processus de Poisson d'intensité λ (cf. la Proposition 2.2).

Théorème 3.16 *Soit $\lambda > 0$, $(T_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi exponentielle de paramètre λ et pour tout $n \geq 1$ soit $S_n = \sum_{k=1}^n T_k$. Alors le processus*

$$X_t = \sum_{n=1}^{\infty} n 1_{[S_n, S_{n+1}[}(t)$$

est un processus de Poisson d'intensité λ .

Les graphiques suivants montrent des trajectoires de processus de Poisson d'intensité $\lambda = 0.5$, $\lambda = 1$ et $\lambda = 2$. Les 10 premiers instants de saut sont respectivement :

- pour $\lambda = 0.5$: 2.177957, 6.744571, 9.640822, 10.29956, 10.86043, 11.98261, 14.91761, 15.45311, 17.62061, 21.04892
- pour $\lambda = 1$: 0.212028, 1.435998, 1.704459, 5.441348, 6.345117, 7.967036, 8.300007, 10.09506, 10.40521, 11.03153
- pour $\lambda = 2$: 0.404272, 1.136381, 1.85529, 1.989455, 2.80864, 2.97061, 3.03802, 3.442472, 3.810711, 4.406239

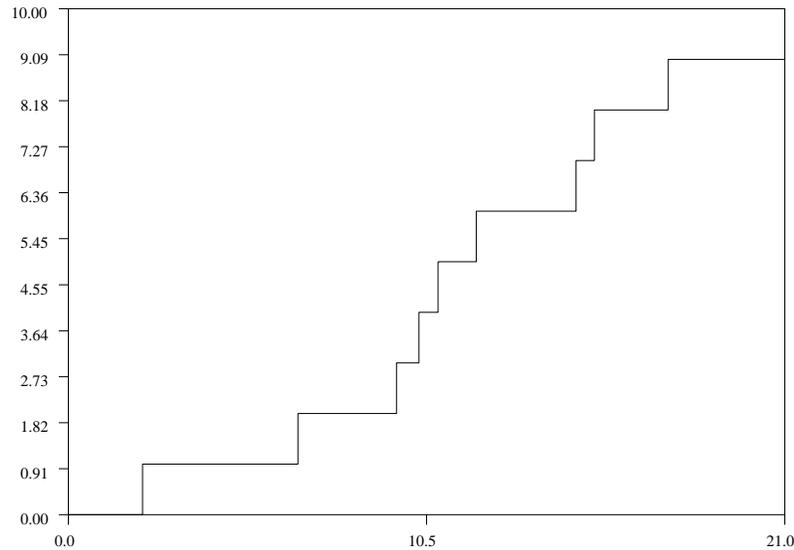
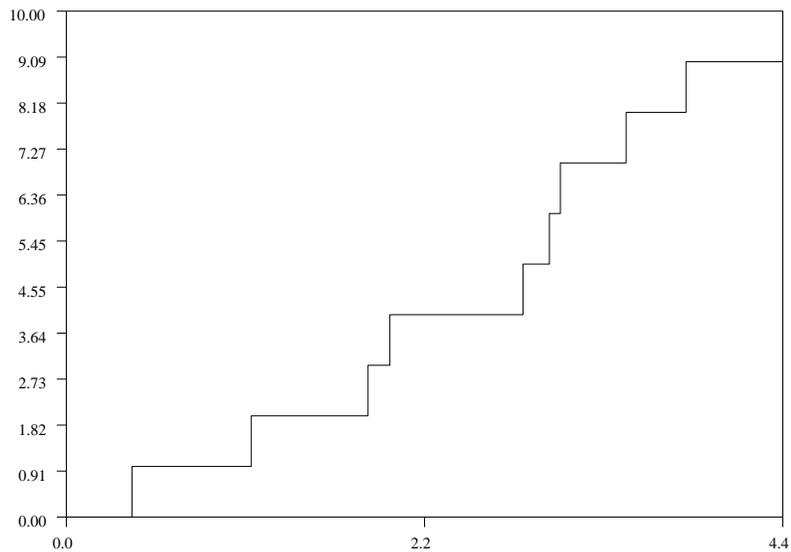
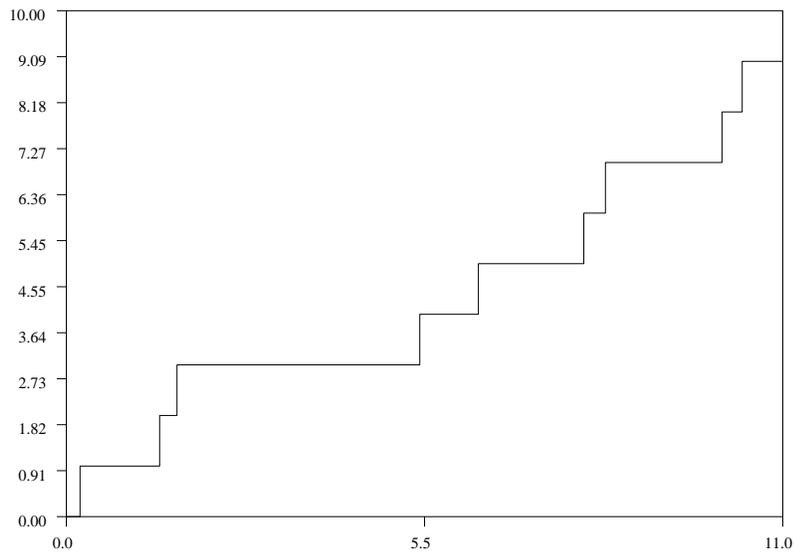


FIG. 14 – Simulation de processus de Poisson d'intensité 0.5, 1 et 2



3.6 Chaînes de Markov

Une chaîne de Markov est une suite $(X_n, n \geq 0)$ de variables aléatoires telle que la loi de X_{n+1} sachant les valeurs du passé X_0, \dots, X_n ne dépend que de X_n . Plus précisément, on a la :

Définition 3.17 Soit \mathbb{E} un espace discret (fini ou dénombrable).

(i) Une matrice de transition $Q = (Q(x, y), x, y \in \mathbb{E})$ est une application $Q : \mathbb{E} \times \mathbb{E} \rightarrow [0, 1]$ telle que $\sum_{y \in \mathbb{E}} Q(x, y) = 1$ pour tout $x \in \mathbb{E}$.

(ii) Une chaîne de Markov homogène de matrice de transition Q est une suite de variables aléatoires à valeurs dans \mathbb{E} telle que pour tout entier $n \geq 1$ et tout $x_0, \dots, x_n, y \in \mathbb{E}$:

$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = y | X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) &= P(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n) \\ &= Q(x_n, y). \end{aligned} \quad (3.30)$$

La loi initiale de la chaîne est la loi μ de X_0 , c'est à dire la probabilité sur la tribu \mathcal{E} des parties de \mathbb{E} telle que pour tout $x \in \mathbb{E}$, $\mu(x) = P(X_0 = x)$.

Le terme $Q(x, y)$ désigne donc la probabilité de passer de l'état x à l'instant n à l'état y à l'instant $n + 1$.

Pour toute fonction $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ positive ou bien telle que $\sum_{y \in \mathbb{E}} Q(x, y) |f(y)| < +\infty$ et toute probabilité ν sur \mathcal{E} , on note

$$(Qf)(x) = \sum_{y \in \mathbb{E}} Q(x, y) f(y) \quad \text{et} \quad (\nu Q)(y) = \sum_{x \in \mathbb{E}} \nu(x) Q(x, y).$$

Alors Qf est une fonction définie sur \mathbb{E} tandis que νQ est une probabilité sur \mathcal{E} et $\int (Qf) d\nu = \int f d(\nu Q)$. On déduit immédiatement de la définition la loi des vecteurs (X_0, \dots, X_n) et de X_n qui sont explicites à l'aide de μ et de Q . Si Q est une matrice de transition sur \mathbb{E} , il en est de même de toutes les puissances Q^n , $n \geq 0$.

Proposition 3.18 Soit $(X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov homogène de matrice de transition Q et de loi initiale μ ; pour tout entier $n \geq 0$, on note $\mathcal{F}_n^0 = \sigma(X_k, 0 \leq k \leq n)$.

(i) Pour tout entier $n \geq 0$ et tout vecteur $(x_0, \dots, x_n) \in \mathbb{E}^{n+1}$:

$$P(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \mu(x_0) Q(x_0, x_1) \cdots Q(x_{n-1}, x_n).$$

(ii) Pour tout entier $n \geq 1$ et pour tout $x, y \in \mathbb{E}$:

$$P(X_n = y | X_0 = x) = Q^n(x, y) \quad \text{et} \quad P(X_n = y) = \sum_{x \in \mathbb{E}} \mu(x) Q^n(x, y) = (\mu Q^n)(y).$$

(iii) Pour toute fonction $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ positive ou bien telle que $\sum_{y \in \mathbb{E}} Q(x, y) |f(y)| < +\infty$ et pour tout entier $n \geq 1$,

$$\begin{aligned} E(f(X_{n+1}) | \mathcal{F}_n^0) &= Qf(X_n), \\ E(f(X_n) | \mathcal{F}_0^0) &= Q^n f(x). \end{aligned}$$

Si $Q(x, y)$ ne dépend pas de x , la suite $(X_n, n \geq 1)$ est une suite indépendante de loi $Q(x, \cdot)$. Un exemple très simple de chaîne de Markov « non triviale » est une marche aléatoire. Il est facile de vérifier qu'une marche aléatoire satisfait les propriétés de la définition 3.17.

La simulation d'une chaîne de Markov est théoriquement très simple si l'on sait simuler les lois μ et $Q(x, \cdot)$ pour tous les états $x \in \mathbb{E}$. L'algorithme correspondant à la simulation de $(X_i, 0 \leq i \leq n)$ est donc :

```

n ← 0
Simuler la loi  $\mu$  et retourner  $X[0]$ 
Pour k = 1 à n
    i ← X[k - 1]
    Simuler la loi  $Q(i, \cdot)$  et retourner j
    X[k] ← j
n ← n + 1
Fin

```

Si l'on souhaite seulement simuler la valeur de X_n , on remplace le tableau $(X[k], 0 \leq k \leq n)$ par X . Si la simulation de chaque loi $Q(i, \cdot)$ est faite par inversion de la fonction de répartition, l'algorithme précédent fournit $X_{n+1} = \Phi(X_n, U_n)$ pour une suite i.i.d. de variables aléatoires $\mathcal{U}([0, 1])$.

Définition 3.19 Soit $(X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov homogène de matrice de transition Q sur l'espace discret \mathcal{E} . La probabilité Π sur \mathcal{E} est invariante si $\Pi Q = \Pi$.

Si Π est une probabilité invariante de la chaîne et si la loi initiale est Π , alors pour tout instant $n \geq 0$, $\Pi Q^n = \Pi$ et toutes les variables aléatoires X_n sont de loi Π . Ce résultat peut être renforcé comme suit :

Proposition 3.20 Soit $(X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov de matrice de transition Q sur l'espace d'états discret \mathbb{E} et de loi initiale Π . Les propriétés suivantes sont équivalentes :

(i) Π est une probabilité invariante.

(ii) La chaîne $(X_n, n \geq 0)$ est strictement stationnaire, c'est à dire que pour tout $n \geq 0$ les lois des vecteurs (X_0, \dots, X_n) et (X_1, \dots, X_{n+1}) coïncident.

Démonstration Puisque X_1 a comme loi ΠQ , la stationnarité entraîne que Π est invariante. Réciproquement, fixons $n \geq 0$, $x_0, \dots, x_n \in \mathbb{E}$; alors, si Π est invariante :

$$\begin{aligned} P(X_1 = x_0, \dots, X_{n+1} = x_n) &= \sum_{y \in \mathbb{E}} \Pi(y) Q(y, x_0) Q(x_0, x_1) \cdots Q(x_{n-1}, x_n) \\ &= (\Pi Q)(x_0) Q(x_0, x_1) \cdots Q(x_{n-1}, x_n) \\ &= P(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n), \end{aligned}$$

ce qui prouve que les lois de (X_0, \dots, X_n) et (X_1, \dots, X_{n+1}) coïncident. \square

Définition 3.21 (i) On dit qu'une matrice A à coefficients positifs ou nuls est irréductible si pour tout $x, y \in \mathbb{E}$, il existe $n \geq 1$ tel que $A^n(x, y) > 0$. Si Q est une matrice de transition irréductible, on dit que la chaîne $(X_n, n \geq 0)$ de matrice de transition Q est irréductible.

(ii) On dit que deux états x, y communiquent s'il existe $n_1, n_2 \geq 1$ tels que $Q^{n_1}(x, y) > 0$ et $Q^{n_2}(y, x) > 0$.

On distingue enfin deux types d'états suivant le nombre de visites de la chaîne.

Définition 3.22 On dit qu'un état $x \in \mathbb{E}$ de la chaîne de Markov $(X_n, n \geq 0)$ issue de x (c'est à dire telle que $X_0 = x$) est récurrent si $\sum_{n \geq 1} 1_{\{X_n = x\}} = +\infty$ p.s. et qu'il est transitoire si $\sum_{n \geq 1} 1_{\{X_n = x\}} < +\infty$ p.s.

Le théorème suivant donne une classification des états.

Théorème 3.23 Un état $x \in \mathbb{E}$ de la chaîne de Markov $(X_n, n \geq 0)$ est soit récurrent, soit transitoire. Si les états x et y communiquent, ils sont de même nature et il existe une partition $(C_i, i \in I)$ de l'ensemble des états récurrents en classes de récurrence telle que si $X_0 = x \in C_i$, alors pour tout entier n , $P(X_n \in C_i) = 1$. Si l'espace des états \mathbb{E} est fini, la chaîne admet au moins un état récurrent.

Si l'ensemble \mathbb{E} des états a N éléments notés $1, \dots, N$, l'algorithme suivant permet de trouver l'ensemble $C(x)$ des états qui communiquent avec x , de déterminer si la chaîne est irréductible et de classer les états.

Algorithme de classification des états. Soit A une matrice logique (dont les éléments sont 0 ou 1) telle que pour tout $i, j = 1, \dots, N$, $A(i, i) = 1$ et pour $i \neq j$, $A(i, j) = 1$ si et seulement si $P(i, j) > 0$. On définit le produit AB de deux matrices logiques A et B (c'est à dire dont tous les termes sont 0 ou 1) carrées $N \times N$ par $(AB)(i, j) = \bigvee_k [A(i, k) \wedge B(k, j)]$. Il est clair que si $i \neq j$, $A^k(i, j) = 1$ si et seulement s'il existe $l \in \{1, \dots, k\}$ tel que $P^l(i, j) > 0$. Remarquons que si les états $x_0 = i, \dots, x_l = j$ sont deux à deux distincts, on a nécessairement $l \leq N - 1$ et que (en supprimant des boucles éventuelles), s'il existe une suite d'états $x_k, 0 \leq k \leq l$, tels que $x_0 = i, x_l = j$ et $P(x_k, x_{k+1}) > 0$ pour $0 \leq k \leq l - 1$, on peut supposer que les états $x_k, 0 \leq k \leq l$ sont deux à deux distincts. On en déduit que pour des états $i \neq j$, il existe un entier $l \geq 1$ tel que $P^l(i, j) > 0$ (c'est à dire que j est accessible à partir de i) si et seulement si $A^{N-1}(i, j) = 1$, ce qui est aussi équivalent au fait que pour tout (ou pour un) entier $k \geq N - 1$, $A^k(i, j) = 1$. On voit donc que la chaîne est irréductible si et seulement si tous les termes de A^k sont égaux à 1 pour un entier $k \geq N - 1$. Il est pratiquement plus rapide de calculer les puissances de A de la forme 2^k , en élevant pas à pas les matrices trouvées au carré, jusqu'au premier entier k tel que $2^k \geq N - 1$. On pourra programmer cet algorithme (qui est lié à la recherche des composantes connexes d'un graphe). L'ensemble $C(x)$ est l'ensemble des états $y \in \mathbb{E}$ tels que $A^k(x, y) = A^k(y, x) = 1$ pour un (tout) entier $k \geq N - 1$. Comme exercice, on pourra donner un critère sur A^k permettant de déterminer les états transitoires et les classes de récurrence.

Exemples :

Marche aléatoire Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes et de même loi à valeurs dans un sous-ensemble fini de \mathbb{R}^d , $S_0 = 0$ et $S_n = \sum_{k=1}^n X_k$. Alors $(S_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov de loi initiale la mesure de Dirac en 0 et de matrice de transition

$$Q(x, y) = P(X_1 = y - x).$$

Modèle de Cox-Ross-Rubinstein Soit $(V_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi définie par $P(V_n = u) = p$ et $P(V_n = d) = 1 - p$, avec $0 < p < 1$. Posons $X_0 = x$, puis $X_{n+1} = X_n V_{n+1}$ pour tout $n \geq 0$. Alors $(X_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov de loi initiale la mesure de Dirac en x et de probabilité de transition

$$Q(x, xu) = p, \quad Q(x, xd) = 1 - p \quad \text{et} \quad Q(x, y) = 0 \quad \text{sinon.}$$

Nombre de piles consécutifs dans un jeu de pile ou face Soit $(Y_n, n \geq 1)$ une suite de variables indépendantes de même loi de Bernoulli de paramètre $p \in [0, 1]$. Soit $N_0 = 0$ et pour tout $n \geq 1$, notons N_n le nombre de 1 consécutifs avant le $n^{\text{ème}}$ tirage, avec par convention $N_n = 0$ si $Y_n = 0$. On vérifie aisément que $N_{n+1} = (N_n + 1) 1_{\{Y_{n+1}=1\}}$, puis que $(N_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov de loi initiale la mesure de Dirac en 0 et de probabilité de transition sur l'ensemble \mathbb{E} des entiers positifs :

$$Q(n, n+1) = p, \quad Q(n, 0) = 1 - p \quad \text{et} \quad Q(n, y) = 0 \quad \text{sinon.}$$

Pour tout entier $l \geq 1$, notons τ_l le premier instant où l'on voit l valeurs 1 consécutives, soit

$$\tau_l = \inf\{k \geq 1 : N_k = l\},$$

et $N_n^l = N_{n \wedge \tau_l}$ la chaîne arrêtée à l'instant τ_l . L'évènement $\{N_n^l = l\}$ décrit donc le fait que l'on a observé au moins l fois des 1 consécutifs lors des n premiers tirages, et l'on a :

$$N_{n+1}^l = (N_n^l + 1) 1_{\{N_n^l < l, Y_{n+1}=1\}} + l 1_{\{N_n^l = l\}}.$$

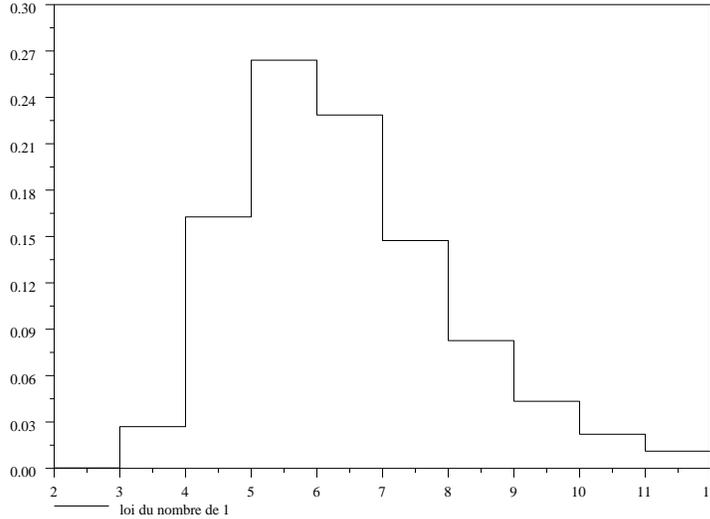
La suite $(N_n^l, n \geq 0)$ est donc une chaîne de Markov de loi initiale la mesure de Dirac en 0 et de probabilité de transition \bar{Q} définie par

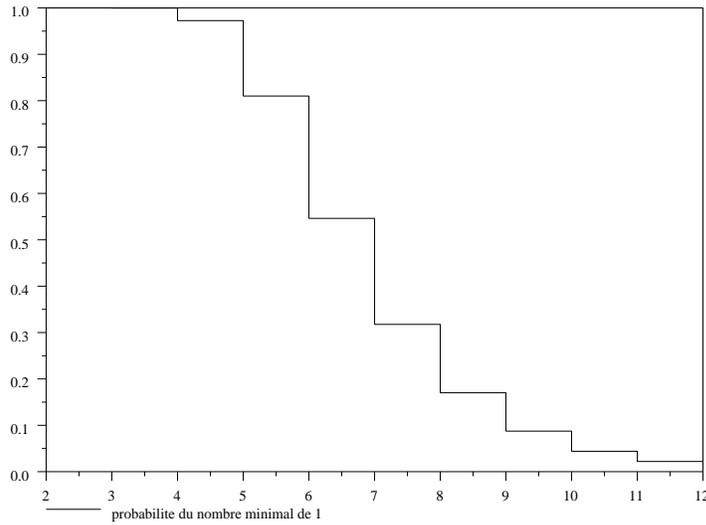
$$\bar{Q}(n, n+1) = p \quad \text{et} \quad \bar{Q}(n, 0) = 1 - p \quad \text{si} \quad n < l, \quad \bar{Q}(l, l) = 1 \quad \text{et} \quad \bar{Q}(x, y) = 0 \quad \text{sinon ;}$$

de plus $\bar{Q}^n(0, l) = P(N_n^l = l)$.

Les deux figures suivantes donnent l'histogramme de la loi de N_{100}^l pour $l = 2, \dots, 12$ lorsque $p = \frac{1}{2}$ obtenues en calculant $\bar{Q}^{100}(0, l) - \bar{Q}^{100}(0, l+1)$ pour ces valeurs de l , puis la probabilité d'avoir au moins des 1 l fois de suite en 100 tirages pour $l = 2, \dots, 12$ (on pourra écrire un algorithme permettant de calculer \bar{Q}^n pour tout p et n) ; On remarque que si l'on est presque sûr d'obtenir au moins 3 fois 1 de suite, la probabilité d'avoir au moins 5 fois 1 de suite (et également 5 fois 0 de suite) vaut 0.81 et est donc « assez élevée » . Elle tombe à environ 0.65 si $p = 0.45$ et vaut 0.92 si $p = 0.55$. Ceci fournit un critère efficace du fait que le paramètre de la loi de Bernoulli est $\frac{1}{2}$.

FIG. 15 – Nombre de 1 parmi 100 tirages d'une loi de Bernoulli de paramètre $\frac{1}{2}$.





3.7 Exercices

Exercice 3.1 Écrire et implémenter un algorithme de simulation sur l'intervalle $[0, T]$ de la diffusion :

$$X_t = X_0 + \int_0^t \cos(X_s) dW_s + \int_0^t \sin(X_s) ds$$

où X_0 est une variable aléatoire de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ indépendante du mouvement Brownien standard réel (W_t) .

Exercice 3.2 Soit $\sigma_i, b_i, i = 1, 2$ des nombres réels, $x \in \mathbb{R}$ et (X_t) la diffusion définie par

$$X_t = x + \int_0^t (\sigma_1 X_s + \sigma_2) dW_s + \int_0^t (b_1 X_s + b_2) ds.$$

Écrire et résoudre l'équation différentielle satisfaite par $e_t = E(X_t)$. Calculer et résoudre les équations différentielles satisfaites par $\phi(t) = E(X_t^2)$. En déduire le comportement asymptotique de $E(X_t)$ et $\text{Var}(X_t)$ quand $t \rightarrow +\infty$. Ces résultats sont-ils cohérents avec les simulations faites dans les cas particuliers $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ ou 0.5 , $b_1 = b_2 = 1$ ou -1 et $x = 1$ dans la figure 9, $\sigma_1 = 1$ ou 0.5 , $\sigma_2 = 0$, $b_1 = 1$ ou -1 , $b_2 = 0$ et $x = 1$ dans les simulations du modèle de Black-Sholes de la figure 10.

Exercice 3.3 Soit σ, b, x des nombres réels.

1. Montrer que la solution de l'EDS

$$X_t = x + \int_0^t \sigma X_s dW_s + \int_0^t b X_s ds$$

a la forme explicite

$$X_t = x \exp \left(\sigma W_t + \left(b - \frac{\sigma^2}{2} \right) t \right).$$

2. Simuler une trajectoire de $(X_t, 0 \leq t \leq 1)$ en utilisant la formule explicite, puis en utilisant un schéma d'Euler de pas 2^{-4} , 2^{-8} et 2^{-16} et tracer sur trois graphiques séparés la « vraie » solution et ses approximations.
3. Simuler une trajectoire de $(X_t, 0 \leq t \leq 1)$ en utilisant la formule explicite, puis en utilisant un schéma de Milstein de pas 2^{-4} , 2^{-8} et 2^{-16} et tracer sur trois graphiques séparés la « vraie » solution et ses approximations.
4. Calculer directement $E(X_1)$, la moyenne empirique de 100 (respectivement 4000 simulations) de $E(X_1)$ et celle des valeurs absolues des erreurs entre les valeurs simulées et la valeur exacte de $E(X_1)$ en utilisant le schéma d'Euler et en utilisant le schéma de Milstein avec les divers pas précédents. Tracer les courbes donnant le logarithme de l'erreur moyenne en fonction du logarithme du pas pour les deux schémas.

Exercice 3.4 Démontrer la Proposition 3.4

Exercice 3.5 On suppose que les hypothèses du Théorème 3.13 sont satisfaites et on cherche à prouver (3.23). Soit $\beta \in]0, \frac{1}{2}[$.

1. Soit $p \in [2, +\infty[$ et $a_n > 0$. Montrer en utilisant (3.21) que pour tout $\lambda > 0$,

$$P \left(n^\beta \sup_{0 \leq t \leq T} |\bar{X}_t^n - X_t| \geq a_n \right) \leq a_n^{-2p} n^{2\beta p} n^{-p}$$

Soit $a_n = n^{-\gamma}$; en choisissant convenablement $\gamma > 0$ et p , montrer que $n^\beta \sup_{0 \leq t \leq T} |\bar{X}_t^n - X_t|$ converge vers 0 p.s.

2. Montrer que si $t_k = \frac{kT}{n}$ et $p \in [2, +\infty[$:

$$\sup_{0 \leq k \leq n-1} E \left(\sup_{t_k \leq t \leq t_{k+1}} |X_t - X_{t_k}|^{2p} \right) \leq C_p n^{-p}.$$

En déduire que pour tout $\lambda > 0$:

$$P \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |X_t - X_{\phi_t^n}| \geq \lambda \right) \leq C_p \lambda^{-2p} n^{-p+1}.$$

En déduire (3.23).

Exercice 3.6 Démontrer (3.18) pour l'interpolé $X^{(n)}$ du schéma d'Euler puis (3.29) pour le schéma de Milstein \tilde{X}^n .

Exercice 3.7 Démontrer le Théorème 3.16.

Exercice 3.8 Soit $\mathbb{E} = \{1, 2, 3, 4\}$, μ la probabilité uniforme sur \mathbb{E} et Q la matrice de transition

$$Q = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0.5 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}.$$

Donner un algorithme de simulation des valeurs de X_n pour $n \leq 100$. Montrer que la chaîne est irréductible. Calculer la probabilité invariante Π de cette chaîne. Calculer Q^n et vérifier que Q^n converge vers une matrice dont toutes les lignes sont égales à Π . Si on note $\delta_n = \max_{i,j \in \mathbb{E}} |Q^n(i, j) - \Pi(j)|$, tracer la courbe $\ln(\delta_n)$ en fonction de $\ln(n)$ pour diverses valeurs de n (par exemple $n = 5, 10, 15, 20, 25, 30$); qu'observe-t-on ?

Exercice 3.9 Soit $\mathbb{E} = \{1, 2, 3, 4, 5\}$, μ la probabilité uniforme sur \mathbb{E} et Q la matrice de transition

$$Q = \begin{pmatrix} 0.8 & 0 & 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0.7 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0.2 & 0 & 0.8 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 & 0.7 & 0 \\ 0.5 & 0.5 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Donner un algorithme de simulation des valeurs de X_n pour $n \leq 100$. Chercher pour chaque état x l'ensemble $C(x)$ des états $y \in \mathbb{E}$ qui communiquent avec x . Calculer les probabilités invariantes Π de cette chaîne. Calculer Q^n et vérifier que cette suite converge vers une limite que l'on déterminera et que l'on comparera aux probabilités invariantes. Si on note $\delta_n = \max_{i,j \in \mathbb{E}} |Q^n(i,j) - \Pi(j)|$, tracer la courbe $\ln(\delta_n)$ en fonction de $\ln(n)$ pour diverses valeurs de n (par exemple $n = 5, 10, 15, 20, 25, 30$) ; qu'observe-t-on ?

Exercice 3.10 Soit $(X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov sur l'espace d'états \mathbb{E} d'état initial $X_0 = x_0$ et de matrice de transition Q . Soit $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction définie sur l'espace d'états \mathbb{E} . On note \mathcal{F}_n^0 la tribu engendrée par les variables aléatoires $X_k, 0 \leq k \leq n$.

1. On suppose que $|\mathbb{E}| < +\infty$ et on considère l'algorithme suivant :

```

Pour  $x \in \mathbb{E}$  faire
   $u(N, x) = f(x)$ 
Pour  $n = N - 1 : 0$ 
  faire
     $u(n, x) = \sum_{y \in \mathbb{E}} Q(x, y) u(n + 1, y)$ 
fin

```

2. Montrer que pour tout $n \in \{0, \dots, N - 1\}$, $E(u(n + 1, X_{n+1}) | \mathcal{F}_n^0) = u(n, X_n)$. En déduire que $u(0, x_0)$ retourne la valeur $E[f(X_N)]$.
3. On suppose que $(X_n, n \geq 0)$ est la marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z} issue de x_0 et on cherche un programme qui permette de calculer $E[f(X_N)]$. Modifier l'algorithme précédent en tenant compte du fait (que l'on justifiera) qu'il suffit de calculer $u(n, y)$ pour $x_0 - n \leq y \leq x_0 + n$.
4. On suppose que la chaîne est du type Cox-Ross-Rubinstein de probabilité de transition $Q(x, x(1 + a)) = p$ et $Q(x, x(1 + b)) = 1 - p$. Écrire le schéma de programme d'une procédure récurrente permettant de calculer $E[(K - X_N)^+]$.

4 Équation de Feynman-Kac et convergence faible des schémas de discrétisation

4.1 Générateur infinitésimal.

Notons $\mathcal{C}_{n,p}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ (resp. $\mathcal{K}_{n,p}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$) l'ensemble des fonctions $u : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^n par rapport à la variable $t \in [0, T]$ et de classe \mathcal{C}^p par rapport à la variable $x \in \mathbb{R}^d$ (resp. et dont les dérivées sont à croissance polynomiales, c'est à dire telles qu'il existe des constantes $C > 0$ et des entiers k tels que chaque dérivée partielle v de u satisfasse l'inégalité $|v(t, x)| \leq C(1 + |x|^k)$). On note $\mathcal{K}_p(\mathbb{R}^d)$ l'ensemble des fonctions $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^p par rapport à la variable $x \in \mathbb{R}^d$ dont les dérivées partielles sont à croissance polynomiales.

Rappelons enfin que si les coefficients de la diffusion sont notés $b = (b^i, 1 \leq i \leq d)$ et $\sigma = (\sigma_j^i, 1 \leq i \leq d, 1 \leq j \leq r)$ et si $a(t, x) = \sigma(t, x) \sigma^*(t, x)$ désigne la matrice carrée symétrique $d \times d$ de type positif définie par $a^{i,j}(t, x) = \sum_{k=1}^r \sigma_k^i(t, x) \sigma_k^j(t, x)$, le générateur de la diffusion (X_t) définie par (3.9) est l'opérateur différentiel défini sur $\mathcal{C}_{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ par :

$$A_t u(t, x) = \sum_{i=1}^d b^i(t, x) \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a^{i,j}(t, x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(t, x). \quad (4.1)$$

Si les coefficients σ et b ne dépendent pas de t , le générateur est alors l'opérateur différentiel défini sur $\mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)$ par :

$$A u(x) = \sum_{i=1}^d b^i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i}(x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a^{i,j}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(x). \quad (4.2)$$

Ainsi, le générateur du mouvement Brownien sur \mathbb{R}^r est $\frac{1}{2}\Delta$, où Δ est le Laplacien défini sur $\mathcal{C}_2(\mathbb{R}^r)$. Le générateur d'une diffusion de Black et Sholes $X_t = x + \int_0^t \sigma X_s dW_s + \int_0^t b X_s ds$ est l'opérateur défini sur $\mathcal{C}_2(\mathbb{R})$ par $A = b x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2 x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Les théorèmes suivants relient le générateur d'une diffusion à des martingales. Les premiers résultats s'appliquent à des diffusions dont les coefficients ne dépendent pas du temps.

Théorème 4.1 *Soit $b : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ et $\sigma : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{rd}$ des fonctions Lipschitziennes, c'est à dire telles qu'il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $x, y \in \mathbb{R}^d$:*

$$|\sigma(x) - \sigma(y)| + |b(x) - b(y)| \leq C|x - y|, \quad (4.3)$$

W un mouvement Brownien standard à valeurs dans \mathbb{R}^r et $(X_t, t \geq 0)$ la diffusion solution de l'équation différentielle stochastique

$$X_t = x + \int_0^t \sigma(X_s) dW_s + \int_0^t b(X_s) ds, \quad (4.4)$$

de générateur A . Alors pour toute fonction $f \in \mathcal{K}_2(\mathbb{R}^d)$, le processus $M_t(f)$ défini par

$$M_t(f) = f(X_t) - f(X_0) - \int_0^t A f(X_s) ds$$

est une martingale pour la filtration $(\mathcal{F}_t = \sigma(W_s, 0 \leq s \leq t), t \geq 0)$.

Démonstration : La formule d'Itô (3.12) entraîne que pour tout $t \geq 0$,

$$f(X_t) - f(X_0) - \int_0^t Af(X_s) ds = \sum_{i=1}^d \sum_{k=1}^r \int_0^t \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_s) \sigma_k^i(X_s) dW_s^k.$$

Il suffit donc de vérifier que les intégrales stochastiques $\int_0^t \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_s) \sigma_k^i(X_s) dW_s^k$ sont des (\mathcal{F}_t) -martingales, ce qui revient à vérifier que pour tout $t \geq 0$,

$$I_{i,k} = E \left(\int_0^t \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(X_s) \sigma_k^i(X_s) \right|^2 ds \right) < +\infty.$$

Les dérivées de f étant à croissance polynomiale, l'inégalité (3.10) montre qu'il existe $p \in [1, +\infty[$ et une constante $C > 0$ tels que $I_{i,k} \leq C t \sup_{0 \leq s \leq t} (1 + E(|X_s|^p)) < +\infty$. \square

Ce théorème entraîne immédiatement que si f est une fonction de classe \mathcal{C}^2 à support compact et si X est la solution de l'EDS (4.4),

$$E(f(X_T)) = f(x) + E \left(\int_0^T Af(X_s) ds \right).$$

Le théorème d'arrêt permet d'étendre cette égalité au cas où T est un temps d'arrêt pour la filtration (\mathcal{F}_t) tel que $E(T) < +\infty$; c'est la formule de Dynkin.

Définition 4.2 On dit que l'opérateur A défini par (4.2) est uniformément elliptique sur $B \subset \mathbb{R}^d$ s'il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $x \in B$ et $y \in \mathbb{R}^d$:

$$\sum_{i,j=1}^d a^{i,j}(x) y_i y_j \geq C |y|^2.$$

Sous cette condition, le processus (X_t) solution de (4.4) admet une densité. On pourra voir la démonstration du résultat suivant par exemple dans [10] :

Théorème 4.3 Soit $\sigma : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{rd}$ et $b : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ des fonctions satisfaisant les conditions (4.3), tel que le générateur A défini par (4.2) soit uniformément elliptique sur \mathbb{R}^d . Alors pour tout $t > 0$ et pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, la loi de la diffusion X_t définie par (4.4) admet une densité $y \rightarrow p(t; x, y)$ par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Si de plus les fonctions σ et b sont de classe \mathcal{C}^∞ avec des dérivées partielles d'ordre supérieur ou égal à 1 bornées, alors la fonction $p(t; x, \cdot)$ est de classe \mathcal{C}^∞ .

Le résultat suivant permet de généraliser le Théorème 4.1 au cas de coefficients dépendant du temps et introduit un coefficient d'actualisation ρ .

Théorème 4.4 Soit σ et b des fonctions qui satisfont les conditions de Lipschitz et de restriction sur la croissance (3.7) et (3.8), W un mouvement Brownien standard de dimension r , X_t la solution de l'équation différentielle stochastique :

$$X_t = x + \int_0^t \sigma(s, X_s) dW_s + \int_0^t b(s, X_s) ds \tag{4.5}$$

et A_t son générateur infinitésimal. Alors pour toute fonction continue bornée $\rho : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ et toute fonction $f \in \mathcal{K}_{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ le processus

$$\begin{aligned} M_t^\rho(f) &= \exp\left(-\int_0^t \rho(s, X_s) ds\right) f(t, X_t) - f(0, X_0) \\ &\quad - \int_0^t \exp\left(-\int_0^s \rho(u, X_u) du\right) \left(\frac{\partial f}{\partial s} + A_s f - \rho f\right)(s, X_s) ds \end{aligned}$$

est une martingale pour la filtration $(\mathcal{F}_t = \sigma(W_s, 0 \leq s \leq t), t \geq 0)$.

Démonstration : La formule d'Itô pour un produit entraîne que

$$\begin{aligned} d\left(\exp\left(-\int_0^t \rho(s, X_s) ds\right) f(t, X_t)\right) &= -\rho(t, X_t) \exp\left(-\int_0^t \rho(s, X_s) ds\right) f(t, X_t) dt \\ &\quad + \exp\left(-\int_0^t \rho(s, X_s) ds\right) d(f(t, X_t)). \end{aligned}$$

La formule d'Itô pour $f(t, X_t)$ permet alors d'écrire :

$$\begin{aligned} \exp\left(-\int_0^t \rho(s, X_s) ds\right) f(t, X_t) &= f(0, X_0) \\ &\quad + \int_0^t \exp\left(-\int_0^s \rho(u, X_u) du\right) \left(\frac{\partial f}{\partial s} + A_s f - \rho f\right)(s, X_s) ds \\ &\quad + \sum_{i=1}^d \sum_{k=1}^r \int_0^t \exp\left(-\int_0^s \rho(u, X_u) du\right) \frac{\partial f}{\partial x_i}(s, X_s) \sigma_k^i(s, X_s) dW_s^k. \end{aligned}$$

La fonction ρ étant bornée, on montre alors comme dans le théorème précédent que les processus $\int_0^t \exp\left(-\int_0^s \rho(u, X_u) du\right) \frac{\partial f}{\partial x_i}(s, X_s) \sigma_k^i(s, X_s) dW_s^k$ sont des martingales, ce qui conclut la démonstration. \square

4.2 Équation de Feynman-Kac, problèmes de Cauchy et de Dirichlet.

Dans cette section, nous allons présenter quelques rapports entre les diffusions et les équations aux dérivées partielles. Ainsi, grâce à la formule d'Itô, il est possible de donner une interprétation probabiliste à certaines équations aux dérivées partielles, ce qui permet ainsi de prouver l'existence de solutions. Nous ne ferons qu'effleurer le sujet et le lecteur pourra se référer à [6], [8] ou [12] pour d'autres exemples ou des conditions plus précises de validité des théorèmes.

L'exemple le plus simple est l'équation de la chaleur en dimension 1, c'est à dire

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x), \quad (t, x) \in]0, +\infty[\times \mathbb{R}, \quad (4.6)$$

où $\sigma > 0$ et où la condition initiale $u(0, x) = f(x)$ est donnée par une fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ borélienne à croissance polynomiale. Pour $t > 0$, notons $p(t; x, \cdot)$ la densité de $x + \sigma W_t$ où $(W_t, t \geq 0)$ est un mouvement Brownien standard à valeurs réelles, c'est à dire la fonction

$$p(t; x, y) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{(x-y)^2}{2\sigma^2 t}}.$$

Un calcul facile montre que $\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$. Notons $u(t, x) = E(f(x + \sigma W_t))$ pour tout $t \geq 0$; alors $u(0, x) = f(x)$. De plus, pour $t > 0$, $u(t, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(t; x, y) f(y) dy$ et la croissance polynomiale de f entraîne que l'on peut appliquer le théorème de dérivation sous le signe intégral et que pour tout couple d'entiers positifs m et n ,

$$\frac{\partial^{n+m}}{\partial t^m \partial x^n} u(t, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^{n+m}}{\partial t^m \partial x^n} p(t; x, y) f(y) dy;$$

la fonction définie par $u(t, x) = E[f(x + \sigma W_t)]$ satisfait donc l'équation $\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x)$ sur $]0, +\infty[\times \mathbb{R}$ et appartient à $\mathcal{K}^{1,2}([\varepsilon, +\infty[\times \mathbb{R})$ pour tout $\varepsilon > 0$. Reste à vérifier le comportement asymptotique de $u(t, y)$ quand $(t, y) \rightarrow (0, x)$. De nouveau, puisque f est à croissance polynomiale, si cette fonction est de plus continue, le théorème de convergence dominée entraîne que pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\lim_{(t,y) \rightarrow (0,x)} u(t, y) = f(x).$$

On a ainsi prouvé que l'équation (4.6) de condition initiale f continue à croissance polynomiale a une solution; reste à prouver l'unicité de la solution de (4.6) pour la condition initiale, ce qui donnera une interprétation probabiliste à la solution de cette EDP. De nouveau, on peut montrer l'unicité de la solution de (4.6) de façon probabiliste.

Théorème 4.5 *Soit u une fonction de classe $\mathcal{C}^{1,2}$ sur $]0, T] \times \mathbb{R}$ qui satisfait l'équation de la chaleur (4.6), telle que $\sup_{0 < t \leq T} |u(t, x)|$ soit à croissance polynomiale en x et telle pour tout $x \in \mathbb{R}$, $\lim_{(t,y) \rightarrow (0,x)} u(t, y) = 0$. Alors, $u(t, x) = 0$ sur $]0, T] \times \mathbb{R}$.*

Démonstration : Fixons $x \in \mathbb{R}$ et soit n un entier tel que $n > |x|$; notons $\tau_n = \inf\{t \geq 0 : |x + \sigma W_t| \geq n\}$. Alors τ_n est un temps d'arrêt pour la filtration Brownienne $\mathcal{F}_t = \sigma(W_s : 0 \leq s \leq t)$. Rappelons le principe de réflexion pour le mouvement Brownien $(W_t, 0 \geq t)$: pour tout $a > 0$ et tout $T \geq 0$,

$$P(\sup\{W_t : 0 \leq t \leq T\} \geq a) = 2P(W_T \geq a).$$

De plus, si Y désigne une variable aléatoire gaussienne centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$, alors pour tout $b > 0$,

$$P(Y \geq b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_b^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \leq \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} \int_b^{+\infty} x e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \frac{C}{b} e^{-\frac{b^2}{2}}.$$

Nous en déduisons pour tout $T_0 \in]0, T]$:

$$\begin{aligned} P(\tau_n < T_0) &\leq P\left(\sup_{0 \leq t \leq T_0} \sigma |W_t| \geq n - |x|\right) \\ &\leq 2P\left(W_{T_0} \geq \frac{n - |x|}{\sigma}\right) + 2P\left(-W_{T_0} \geq \frac{n - |x|}{\sigma}\right) \\ &\leq C \int_{\frac{n - |x|}{\sigma\sqrt{T_0}}}^{+\infty} e^{-\frac{u^2}{2}} du \\ &\leq C \frac{\sigma\sqrt{T_0}}{n - |x|} \exp\left(-\frac{(n - |x|)^2}{2T_0\sigma^2}\right). \end{aligned}$$

On en déduit que pour tout $T_0 \in]0, T]$, $p > 0$, $n^p P(\tau_n < T_0) \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$. Pour tout $t \in [0, T[$ et $0 \leq s < T - t$ notons

$$v(s, x) = u(T - t - s, x).$$

La formule d'Itô, le fait que u soit solution de (4.6) et le théorème d'arrêt pour les martingales entraînent que pour $0 \leq s < T - t$,

$$E\left(v(s \wedge \tau_n, x + \sigma W_{s \wedge \tau_n})\right) = v(0, x) + E\left(\int_0^{s \wedge \tau_n} \frac{\partial v}{\partial x}(\theta, x + \sigma W_\theta) \sigma dW_\theta\right) = v(0, x).$$

De plus, la croissance imposée à u montre que :

$$|v(s, x + \sigma W_s)| 1_{\{s < \tau_n\}} + |v(\tau_n, x + \sigma W_{\tau_n})| 1_{\{s \geq \tau_n\}} \leq \sup_{\substack{0 \leq s \leq T-t \\ |y| \leq n}} |u(T-t-s, y)| \leq C n^p,$$

tandis que lorsque $s \rightarrow T-t$, la continuité p.s. des trajectoires de W entraînent $v(s, x + W_s) \rightarrow 0$ presque sûrement. Le théorème de convergence dominée permet de déduire que lorsque $s \rightarrow T-t$, $E(v(s, x + \sigma W_s) 1_{\{s < \tau_n\}}) \rightarrow 0$. D'autre part le théorème de convergence dominée entraîne en faisant tendre s vers $T-t$ que

$$u(T-t, x) = E(v(\tau_n, x + \sigma W_{\tau_n}) 1_{\{\tau_n \leq T-t\}}).$$

La restriction sur la croissance de u et la convergence précédente de $n^p P(\tau_n < T-t)$ vers 0 lorsque $n \rightarrow +\infty$ montrent que $u(T-t, x) = 0$, ce qui conclut la démonstration. \square

La démonstration précédente a fait apparaître une martingale liée à la formule d'Itô comme dans la section précédente, ainsi qu'un retournement du temps (changement de t en $T-t$), ce qui a permis de remplacer $\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ par $-\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. On peut ainsi considérer le problème similaire à celui de l'équation (4.6) sur l'intervalle de temps $[0, T]$ en « renversant le temps » et imposant une condition finale :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(t, x) = 0 & \text{pour } (t, x) \in [0, T[\times \mathbb{R}, \\ v(T, x) = f(x) & \text{pour } x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (4.7)$$

On pourra montrer comme exercice le théorème suivant :

Théorème 4.6 *Soit v une fonction de $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}) \cap \mathcal{K}^0([0, T] \times \mathbb{R})$ qui satisfait (4.7). Alors*

$$v(t, x) = E[f(x + \sigma(W_T - W_t))] = E[f(x + \sigma W_{T-t})] \quad \text{pour } (t, x) \in [0, T[\times \mathbb{R}, \quad (4.8)$$

et

$$v(t, x + \sigma W_t) = E(f(x + \sigma W_T) | \mathcal{F}_t).$$

De plus, si la fonction f appartient à $\mathcal{K}^0(\mathbb{R})$, alors la fonction v définie par (4.8) est l'unique solution de (4.7) dans l'espace des fonctions continues sur $[0, T] \times \mathbb{R}$ qui appartiennent à $\mathcal{C}^{1,2}([0, T-\varepsilon] \times \mathbb{R})$ pour tout $\varepsilon \in]0, T[$.

Le théorème suivant fournit une interprétation probabiliste à une équation aux dérivées partielles qui généralise (4.7) ; c'est l'équation de Feynman-Kac pour le mouvement Brownien. La base des résultats est la remarque sur le lien entre $\frac{\partial p}{\partial t}(t; x, y)$ et $\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(t; x, y)$ lorsque p est la densité d'un mouvement Brownien standard unidimensionnel. Cette propriété se généralise immédiatement en dimension d : pour tout $t > 0$, $x, y \in \mathbb{R}^d$, soit

$$p(t; x, y) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\right)^d \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^d (x_i - y_i)^2}{2t}\right);$$

alors si Δ désigne le Laplacien $\sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$,

$$\frac{\partial p}{\partial t}(t; x, y) = \frac{1}{2} \Delta p(t; x, y).$$

Définition 4.7 Soit $T > 0$, m un nombre réel, $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $\rho : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow [m, +\infty[$ et $g : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ des fonctions continues. On dit qu'une fonction $v \in \mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ est solution du problème de Cauchy de potentiel ρ , de Lagrangien g et de condition terminale f si elle est solution de :

$$\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \frac{1}{2} \Delta v(t, x) - \rho(t, x) v(t, x) + g(t, x) = 0, \quad (t, x) \in [0, T[\times \mathbb{R}^d, \quad (4.9)$$

$$v(T, x) = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^d. \quad (4.10)$$

Théorème 4.8 (*Théorème de Feynman-Kac pour le mouvement Brownien*) Soit f, g, ρ comme dans la définition 4.7 tels que $\sup_{0 \leq t \leq T} |g(t, x)|$ soit à croissance polynomiale en x et $v \in \mathcal{C}^{1,2}([0, T[\times \mathbb{R}^d) \cap \mathcal{K}^0([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ une solution du problème de Cauchy (4.9) de condition terminale f (4.10). Alors si W désigne un mouvement Brownien standard de dimension d , la fonction v admet la représentation stochastique :

$$v(t, x) = E \left[f(x + W_{T-t}) \exp \left(- \int_0^{T-t} \rho(t+s, x + W_s) ds \right) + \int_0^{T-t} g(t+s, x + W_s) \exp \left(- \int_0^s \rho(t+u, x + W_u) du \right) ds \right]. \quad (4.11)$$

Démonstration : En utilisant la formule d'Itô et l'EDP (4.9) on déduit que pour tout $t \in [0, T[$:

$$d_s \left[v(t+s, x + W_s) \exp \left(- \int_0^s \rho(t+u, x + W_u) du \right) \right] = \exp \left(- \int_0^s \rho(t+\theta, x + W_\theta) d\theta \right) \left[-g(t+s, x + W_s) ds + \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} v(t+s, x + W_s) dW_s^i \right].$$

Soit $\varepsilon \in]0, T[$, $n > |x|$ et $\tau_n = \inf\{t \geq 0 : |x + W_t| \geq n\sqrt{d}\}$; puisque $\rho \geq m$ et $v \in \mathcal{C}^{1,2}([0, T[\times \mathbb{R}^d)$, le processus

$$\int_0^s \exp \left(- \int_0^u \rho(t+\theta, x + W_\theta) d\theta \right) \frac{\partial}{\partial x_i} v(t+u, x + W_u) dW_u^i, \quad 0 \leq s \leq T - \varepsilon - t$$

est une martingale de carré intégrable et le théorème d'arrêt entraîne pour tout $\tau \in]0, T - \varepsilon - t[$ en intégrant entre 0 et $\tau \wedge \tau_n$, $v(t, x) = \sum_{i=1}^3 T_{n,\tau}^i(t, x)$, où :

$$\begin{aligned} T_{n,\tau}^1(t, x) &= E \left[\int_0^{\tau \wedge \tau_n} g(t+s, x + W_s) \exp \left(- \int_0^s \rho(t+u, x + W_u) du \right) ds \right], \\ T_{n,\tau}^2(t, x) &= E \left[v(t + \tau_n, x + W_{\tau_n}) \exp \left(- \int_0^{\tau_n} \rho(t+s, x + W_s) ds \right) 1_{\{\tau_n \leq \tau\}} \right], \\ T_{n,\tau}^3(t, x) &= E \left[v(t + \tau, x + W_\tau) \exp \left(- \int_0^\tau \rho(t+s, x + W_s) ds \right) 1_{\{\tau_n > \tau\}} \right]. \end{aligned}$$

De nouveau, puisque $\rho \geq m$ et $\sup_{0 \leq t \leq T} g(t, \cdot)$ est à croissance polynomiale, le théorème de convergence dominée entraîne que lorsque $n \rightarrow +\infty$ et $\tau \rightarrow T - \varepsilon - t$,

$$T_{n,\tau}^1(t, x) \rightarrow E \left[\int_0^{T-\varepsilon-t} g(t+s, x + W_s) \exp \left(- \int_0^s \rho(t+u, x + W_u) du \right) ds \right].$$

La croissance polynomiale de v entraîne que terme $T_{n,\tau}^2$ est dominé par

$$C n^p P(\tau_n \leq T) \leq C n^p \sum_{i=1}^d P\left(\sup_{0 \leq s \leq T} |W_s^i| \geq n - |x|\right) \leq C n^p \exp(-c(n - |x|)^2),$$

ce qui montre que lorsque $n \rightarrow +\infty$, $T_{n,\tau}^2(t, x) \rightarrow 0$. Le théorème de convergence dominée entraîne enfin que lorsque $n \rightarrow +\infty$ et $\tau \rightarrow T - \varepsilon - t$,

$$T_{n,\tau}^3(t, x) \rightarrow E\left[v(T - \varepsilon, x + W_{T-\varepsilon-t}) \exp\left(-\int_0^{T-\varepsilon-t} \rho(t+s, x + W_s) ds\right)\right],$$

ce qui termine la démonstration de (4.11) en faisant tendre ε vers 0. \square

Remarque 4.9 Sous les hypothèses du théorème 4.8, v admet également la représentation suivante :

$$\begin{aligned} v(t, x) = & E\left[f(x + W_T - W_t) \exp\left(-\int_t^T \rho(s, x + W_s - W_t) ds\right)\right. \\ & \left. + \int_t^T g(s, x + W_s - W_t) \exp\left(-\int_t^s \rho(u, x + W_u - W_t) du\right) ds\right]. \end{aligned}$$

C'est cette dernière représentation qui se généralisera à des diffusions quelconques en remplaçant le Laplacien par le générateur infinitésimal.

Définition 4.10 Soit $\sigma : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ et $b : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ des fonctions satisfaisant les conditions (3.7) et (3.8) et soit A_t le générateur infinitésimal défini sur $\mathcal{C}_{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ par (4.1) :

$$A_t u(t, x) = \sum_{i=1}^d b^i(t, x) \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d a^{i,j}(t, x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(t, x).$$

Soit m un nombre réel, $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $g : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ et $\rho : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow [m, +\infty[$ des fonctions continues. La fonction $v \in \mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d) \cap \mathcal{K}^0([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ satisfait le problème de Cauchy d'opérateur A_t , de potentiel ρ , de Lagrangien g et de condition terminale f si c'est une fonction continue sur $[0, T] \times \mathbb{R}^d$ et si

$$\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + A_t v(t, x) - \rho(t, x) v(t, x) + g(t, x) = 0 \quad \text{pour } (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}^d, \quad (4.12)$$

$$v(T, x) = f(x) \quad \text{pour } x \in \mathbb{R}^d. \quad (4.13)$$

Le théorème suivant étend l'équation de Feynman-Kac à ce problème de Cauchy plus général :

Théorème 4.11 (*Théorème de Feynman-Kac*) Soit σ et b des fonctions satisfaisant les conditions (3.7) et (3.8), f, g, ρ des fonctions satisfaisant les conditions de la définition 4.10. Supposons que $f \in \mathcal{K}^0(\mathbb{R}^d)$ et que $\sup_{0 \leq t \leq T} |g(t, x)|$ est à croissance polynomiale. Pour tout $t \in [0, T[$ et $x \in \mathbb{R}^d$, notons pour $t \leq s \leq T$:

$$X_s^{t,x} = x + \int_t^s \sigma(u, X_u^{t,x}) dW_u + \int_t^s b(u, X_u^{t,x}) du. \quad (4.14)$$

Alors une solution v du problème de Cauchy (4.12) et (4.13) admet la représentation stochastique :

$$\begin{aligned} v(t, x) &= E \left[f(X_T^{t,x}) \exp \left(- \int_t^T \rho(s, X_s^{t,x}) ds \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_t^T g(s, X_s^{t,x}) \exp \left(- \int_t^s \rho(u, X_u^{t,x}) du \right) ds \right]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

De plus, si $g = 0$ et si $(X_t = X_t^{0,x}, t \in [0, T])$ est la diffusion solution de (3.9), alors pour tout $t \in [0, T]$,

$$v(t, X_t) = E \left[\exp \left(- \int_t^T \rho(s, X_s) ds \right) f(X_T) \middle| \mathcal{F}_t \right]. \quad (4.16)$$

Démonstration : Lorsque $g = 0$, le théorème 4.4 montre que si v résout l'équation (4.12), le processus :

$$M_s^{t,x} = \exp \left(- \int_t^s \rho(u, X_u^{t,x}) du \right) v(s, X_s^{t,x}), \quad s \in [t, T]$$

est une \mathcal{F}_t -martingale, ce qui entraîne que $M_t^{t,x} = E(M_T^{t,x} | \mathcal{F}_t)$. La propriété de martingale de $(M_s^{0,x}, s \in [0, T])$ et la condition (4.13) montrent alors (4.16). Remarquons que de même, la condition (4.13) entraîne que pour tout $\varepsilon \in]0, T[$ et $t \in [0, T - \varepsilon]$,

$$v(t, x) = v(t, X_t^{t,x}) = E \left[\exp \left(- \int_t^{T-\varepsilon} \rho(u, X_u^{t,x}) du \right) v(T - \varepsilon, X_{T-\varepsilon}^{t,x}) \middle| \mathcal{F}_t \right],$$

qui correspond bien à (4.15) lorsque $g = 0$.

Pour prouver (4.15) dans le cas général, nous procédons comme dans la démonstration du Théorème 4.8. Fixons $(t, x) \in [0, T[\times \mathbb{R}^d$, $\varepsilon \in]0, T - t[$ et notons $\tau_n = \inf\{s \geq t, |X_s^{t,x}| \geq n\}$. La formule d'Itô et le théorème d'arrêt pour les martingales entraînent que $v(t, x) = \sum_{i=1}^3 T_n^i$, avec :

$$\begin{aligned} T_n^1(t, x) &= E \left[\int_t^{(T-\varepsilon) \wedge \tau_n} g(s, X_s^{t,x}) \exp \left(- \int_t^s \rho(u, X_u^{t,x}) du \right) ds \right], \\ T_n^2(t, x) &= E \left[v(\tau_n, X_{\tau_n}^{t,x}) \exp \left(- \int_t^{\tau_n} \rho(s, X_s^{t,x}) ds \right) 1_{\{\tau_n \leq T-\varepsilon\}} \right], \\ T_n^3(t, x) &= E \left[v(T - \varepsilon, X_{T-\varepsilon}^{t,x}) \exp \left(- \int_0^{T-\varepsilon} \rho(s, X_s^{t,x}) ds \right) 1_{\{\tau_n > T-\varepsilon\}} \right]. \end{aligned}$$

Une généralisation immédiate de (3.10) basée sur le lemme de Gronwall montre que pour tout $p \in [1, +\infty[$, $E(\sup_{t \leq s \leq T} |X_s^{t,x}|^p) \leq C_p (1 + |x|^p)$. Comme dans le Théorème 4.8, le théorème de convergence dominée et la croissance polynomiale de g montrent que, lorsque $n \rightarrow +\infty$,

$$T_n^1(t, x) \rightarrow E \left[\int_t^{T-\varepsilon} g(s, X_s^{t,x}) \exp \left(- \int_t^s \rho(u, X_u^{t,x}) du \right) ds \right].$$

Il existe $K > 0$ tel que le terme $|T_n^2(t, x)|$ est dominé par $C n^K P(\tau_n \leq n)$. Pour tout $p \in [1, +\infty[$,

$$P(\tau_n \leq T) \leq C_p n^{-p} E \left(\sup_{t \leq s \leq T} |X_s^{t,x}|^p \right) \leq C_p n^{-p}.$$

Choissant $p > K$ nous obtenons $T_n^2(t, x) \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow +\infty$. Le théorème de convergence dominée entraîne que lorsque $n \rightarrow +\infty$,

$$T_n^3(t, x) \rightarrow E \left[v(T - \varepsilon, X_{T-\varepsilon}^{t,x}) \exp \left(- \int_0^{T-\varepsilon} \rho(s, X_s^{t,x}) ds \right) \right],$$

ce qui termine la démonstration en faisant tendre ε vers 0. \square

Remarque 4.12 Dans le cas particulier où les coefficients b et σ sont indépendants du temps, de classe \mathcal{C}^4 à dérivées partielles d'ordre 1 à 4 bornées, $\rho = 0$, $g = 0$ et $f \in \mathcal{K}^4(\mathbb{R}^d)$, si

$$X_t = x + \int_0^t \sigma(X_s) dW_s + \int_0^t b(X_s) ds,$$

la fonction $u : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ définie par :

$$u(t, x) = E [f(X_T) | \mathcal{F}_t]$$

appartient à $\mathcal{K}^4([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ et est solution de l'EDP sur $[0, T] \times \mathbb{R}^d$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{i=1}^d b^i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma \sigma^*)^{i,j}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = 0, \quad (4.17)$$

avec la condition terminale $u(T, \cdot) = f(\cdot)$. Dans ce cas, la solution du problème de Cauchy existe et est unique.

Remarque 4.13 Si les fonctions $\sigma : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{rd}$ et $b : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ sont de classe \mathcal{C}^∞ avec des dérivées partielles bornées telles que le générateur A est uniformément elliptique sur \mathbb{R}^d et si $p(t; x, \cdot)$ désigne la densité de la loi de X_t , $t > 0$ donnée par le théorème 4.3, alors :

$$\frac{\partial p}{\partial t}(t; x, y) = A p(t; x, y)$$

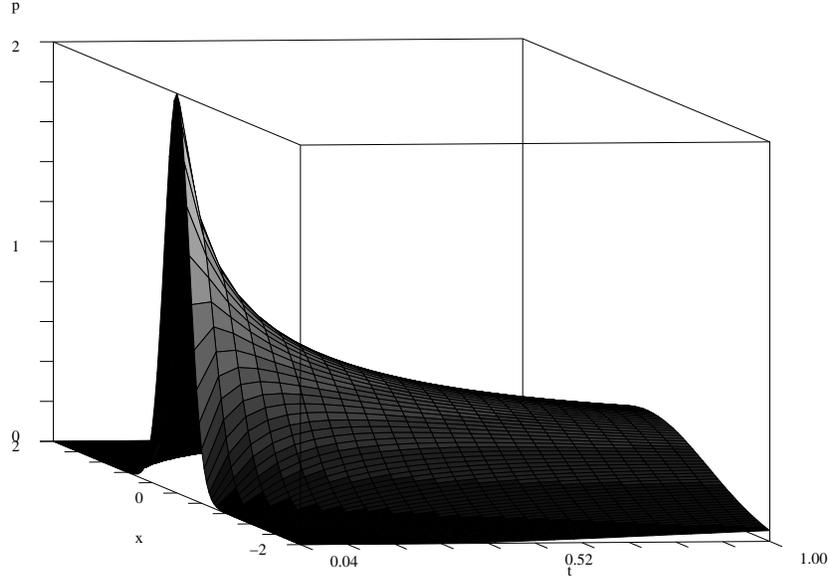
et

$$\frac{\partial p}{\partial t}(t; x, y) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} [a^{i,j}(y) p(t; x, y)] - \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial y_i} [b^i(y) p(t; x, y)].$$

De plus, quand $t \rightarrow 0$, la probabilité $p(t; x, y) dy$ converge faiblement vers la mesure de Dirac δ_x . Ces équations et les EDP précédentes montrent que $p(t; x, y)$ est la solution fondamentale des problèmes de Cauchy avec condition initiale ou finale; ceci traduit le fait que la solution de ces problèmes de Cauchy est obtenue en prenant le produit de convolution de $p(t; \cdot)$ avec la condition initiale (ou finale). Les équations satisfaites par $p(t; x, y)$ généralisent celles observées sur la densité de la loi du mouvement Brownien à la base de tous ces résultats.

La figure suivante montre l'aspect du noyau de la chaleur $p(t; 0, x)$ pour $t \in]1/N, 1]$ et $x \in [-2, 2]$ avec $N = 25$.

FIG. 16 – Représentation du noyau de la chaleur en dimension 1



Nous considérons maintenant des problèmes de Dirichlet. Soit \mathcal{O} un ouvert borné de \mathbb{R}^d , $\overline{\mathcal{O}}$ son adhérence, $\partial\mathcal{O}$ sa frontière et $\Phi : \partial\mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue; nous considérons maintenant un problème de Dirichlet, c'est à dire une EDP satisfaite par la fonction v dans \mathcal{O} (avec éventuellement une condition initiale ou terminale) et avec comme condition au bord $v = \Phi$ sur $\partial\mathcal{O}$.

Le premier résultat donne une interprétation probabiliste d'un tel problème de Dirichlet en horizon infini à l'aide d'une diffusion dont les coefficients ne dépendent pas du temps.

Théorème 4.14 Soit \mathcal{O} un ouvert borné de \mathbb{R}^d , m un nombre réel, $\rho : \overline{\mathcal{O}} \rightarrow [m, +\infty[$, $g : \overline{\mathcal{O}} \rightarrow \mathbb{R}$ et $\Phi : \partial\mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}$ des fonctions continues, $\sigma : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{dr}$ et $b : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ des fonctions globalement Lipschitziennes et

$$A = \sum_{i=1}^d b^i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma \sigma^*)^{i,j}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}$$

le générateur associé. Une fonction continue u sur $\overline{\mathcal{O}}$ de classe \mathcal{C}^2 dans \mathcal{O} est solution du problème de Dirichlet si :

$$Au(x) - \rho(x)u(x) + g(x) = 0 \quad \text{dans } \mathcal{O}, \quad (4.18)$$

$$u(x) = \Phi(x) \quad \text{dans } \partial\mathcal{O}. \quad (4.19)$$

Soit W un mouvement Brownien standard de dimension r et pour tout $x \in \mathcal{O}$, soit

$$X_t^x = x + \int_0^t \sigma(X_s) dW_s + \int_0^t b(X_s) ds,$$

et

$$\tau_{\mathcal{O}}^x = \inf\{t \geq 0 : X_t^x \notin \mathcal{O}\}.$$

Alors, si $P(\tau_{\mathcal{O}}^x < +\infty) = 1$ pour tout $x \in \mathcal{O}$, et si u est une solution du problème de Dirichlet (4.18) et (4.19), alors u admet la représentation suivante :

$$u(x) = E \left[\Phi(X_{\tau_{\mathcal{O}}^x}^x) \exp \left(- \int_0^{\tau_{\mathcal{O}}^x} \rho(X_s^x) ds \right) + \int_0^{\tau_{\mathcal{O}}^x} g(X_t^x) \exp \left(- \int_0^t \rho(X_s^x) ds \right) dt \right]. \quad (4.20)$$

Démonstration : Pour tout $\varepsilon > 0$, notons $\mathcal{O}_\varepsilon = \{x \in \mathcal{O} : d(x, \delta\mathcal{O}) > \varepsilon\}$ et

$$\tau_{\mathcal{O}_\varepsilon}^x = \inf\{t \geq 0 : X_t^x \notin \mathcal{O}_\varepsilon\}.$$

Le théorème 4.4 et le théorème d'arrêt montrent que le processus

$$M_t = u(X_{t \wedge \tau_{\mathcal{O}_\varepsilon}^x}^x) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\mathcal{O}_\varepsilon}^x} \rho(X_s^x) ds \right) + \int_0^{t \wedge \tau_{\mathcal{O}_\varepsilon}^x} g(X_s^x) \exp \left(- \int_0^s \rho(X_\theta^x) d\theta \right) ds$$

est une (\mathcal{F}_t) -martingale. De plus le fait que \mathcal{O}_ε soit borné, l'équation (3.10), la minoration de ρ et la continuité de u et g sur $\overline{\mathcal{O}_\varepsilon}$ montrent que cette martingale est bornée dans L^p , $p > 1$, donc uniformément intégrable. De plus, $E(M_0) = u(x)$ tandis que lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, $E(M_\infty) = \lim_{t \rightarrow +\infty} E(M_t)$ coïncide avec le membre de droite de (4.20), ce qui termine la démonstration. \square

Le théorème précédent montre donc que, si $P(\tau_{\mathcal{O}}^x < +\infty) = 1$ pour tout $x \in \mathcal{O}$, la solution u du problème de Dirichlet (4.18) et (4.19) est unique. Dans le cas particulier $r = d$, $\sigma = Id$, $b = 0$, $g = 0$ et $\rho = 0$, le problème de Cauchy précédent revient donc à la recherche des fonctions u harmoniques sur \mathcal{O} (c'est à dire telles que $\Delta u = 0$ sur \mathcal{O}) telles que $u(x) = \Phi(x)$ sur $\partial\mathcal{O}$. Puisque pour tout $i = 1, \dots, d$ la trajectoire de $(W_t^i, t \geq 0)$ est presque sûrement non bornée, dans ce cas, pour tout $x \in \mathcal{O}$, $P(\tau_{\mathcal{O}}^x < +\infty) = 1$ et la solution du problème de Dirichlet (qui existe) est donc unique. Dans le cas d'une diffusion X_t^x , cette propriété requiert des hypothèses supplémentaires qui impliquent que les trajectoires de X_t^x « ressemblent » à celles du Brownien.

Si l'opérateur A est uniformément elliptique sur \mathcal{O} , $P(\tau_{\mathcal{O}}^x < +\infty) = 1$ pour tout $x \in \mathcal{O}$ et, si elle existe, la solution du problème de Dirichlet (4.18) et (4.19) est unique. Nous renvoyons le lecteur à [10] pour une démonstration de ce résultat, ainsi que pour des conditions suffisantes de régularité sur \mathcal{O} pour l'existence d'une solution.

Le résultat suivant fait appel à une diffusion dont les coefficients dépendent du temps. L'EDP satisfaite dans \mathcal{O} est parabolique et nous imposons une condition terminale similaire à celle du problème de Cauchy.

Théorème 4.15 *Soit σ et b des fonctions satisfaisant les conditions (3.7) et (3.8), A_t l'opérateur différentiel*

$$A_t = \sum_{i=1}^d b^i(t, x) \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma \sigma^*)^{i,j}(t, x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Soit \mathcal{O} un ouvert borné de \mathbb{R}^d dont la frontière est de classe \mathcal{C}^2 , m un nombre réel, $\rho : [0, T] \times \overline{\mathcal{O}} \rightarrow [m, +\infty[$, $g : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $\Phi : [0, T] \times \partial\mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}$ et $f : [0, T] \times \overline{\mathcal{O}} \rightarrow \mathbb{R}$ des fonctions continues. Soit v une fonction de classe $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathcal{O})$ dont les dérivées partielles par rapport

à x sont bornées sur $[0, T] \times \overline{\mathcal{O}}$ et solution de l'équation parabolique avec les conditions de Dirichlet au bord :

$$\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + A_t v(t, x) - \rho(t, x) v(t, x) + g(t, x) = 0 \quad \text{dans } [0, T[\times \mathcal{O}, \quad (4.21)$$

$$v(T, x) = f(x) \quad \text{dans } \overline{\mathcal{O}}, \quad (4.22)$$

$$v(t, x) = \Phi(t, x) \quad \text{dans } [0, T[\times \partial\mathcal{O}. \quad (4.23)$$

Alors si pour tout $t \in [0, T[$ et $x \in \mathcal{O}$, $X_s^{t,x}$ désigne la diffusion solution de (4.14) et si

$$\tau_{\mathcal{O}}^{t,x} = \inf\{s \geq t : X_s^{t,x} \notin \mathcal{O}\},$$

v admet la représentation stochastique :

$$\begin{aligned} v(t, x) = E & \left[\int_t^{T \wedge \tau_{\mathcal{O}}^{t,x}} \exp\left(-\int_t^s \rho(\theta, X_\theta^{t,x}) d\theta\right) g(s, X_s^{t,x}) ds \right. \\ & + \exp\left(-\int_t^T \rho(s, X_s^{t,x}) ds\right) f(X_T^{t,x}) 1_{\{\tau_{\mathcal{O}}^{t,x} \geq T\}} \\ & \left. + \exp\left(-\int_t^{\tau_{\mathcal{O}}^{t,x}} \rho(s, X_s^{t,x}) ds\right) \Phi\left(\tau_{\mathcal{O}}^{t,x}, X_{\tau_{\mathcal{O}}^{t,x}}^{t,x}\right) 1_{\{\tau_{\mathcal{O}}^{t,x} < T\}} \right]. \quad (4.24) \end{aligned}$$

Démonstration : Fixons $(t, x) \in [0, T[\times \mathcal{O}$ et pour tout $n \geq 1$ notons $\mathcal{O}_n = \{x \in \mathcal{O} : d(x, \mathcal{O}^c) > \frac{1}{n}\}$ et $\tau_n = \inf\{s \geq t : |X_s^{t,x}| \geq n\} \wedge \inf\{s \geq t : X_s^{t,x} \notin \mathcal{O}_n\}$. Le raisonnement fait au début de la démonstration du théorème 4.11 et le théorème d'arrêt montrent que d'après l'EDP satisfaite par v sur $[0, T[\times \mathcal{O}$ pour tout $n \geq |x|$ tel que $d(x, \mathcal{O}^c) > \frac{1}{n}$, le processus $(M_s, s \in [t, T])$ défini par

$$M_s^n = \exp\left(-\int_t^{s \wedge \tau_n} \rho(r, X_r^{t,x}) dr\right) v(s \wedge \tau_n, X_{s \wedge \tau_n}^{t,x}) + \int_t^{s \wedge \tau_n} \exp\left(-\int_t^r \rho(\theta, X_\theta^{t,x}) d\theta\right) g(r, X_r^{t,x}) dr$$

est une martingale. On en déduit que $v(t, x) = E(M_T^n) = \sum_{i=1}^3 T_n^i(t, x)$ où :

$$\begin{aligned} T_n^1(t, x) &= E \left[\int_t^{T \wedge \tau_n} g(s, X_s^{t,x}) \exp\left(-\int_t^s \rho(u, X_u^{t,x}) du\right) ds \right], \\ T_n^2(t, x) &= E \left[v(\tau_n, X_{\tau_n}^{t,x}) \exp\left(-\int_t^{\tau_n} \rho(s, X_s^{t,x}) ds\right) 1_{\{\tau_n \leq T\}} \right], \\ T_n^3(t, x) &= E \left[v(T, X_T^{t,x}) \exp\left(-\int_0^T \rho(s, X_s^{t,x}) ds\right) 1_{\{\tau_n > T\}} \right]. \end{aligned}$$

Il suffit alors de faire tendre n vers l'infini et d'utiliser la condition terminale à l'instant T sur l'ensemble $\{T < \tau_{\mathcal{O}}^{t,x}\}$ et la condition au bord sur l'ensemble $\{\tau_{\mathcal{O}}^{t,x} \leq T\}$. Les détails techniques sont laissés en exercice. \square

On peut aussi donner une interprétation probabiliste d'un problème de Neumann dans lequel la condition (4.23) est remplacée par $\sum_{i=1}^d \frac{\partial v}{\partial x_i}(t, x) \nu_i(x) = \Phi(t, x)$ dans $[0, T[\times \partial\mathcal{O}$, où $\nu(x)$ est un champ de vecteurs dans $\overline{\mathcal{O}}$ tel que si $n(x)$ désigne la normale sortante de \mathcal{O} , $\langle \nu(x), n(x) \rangle > 0$ sur $\partial\mathcal{O}$. Nous renvoyons à [17] ou [12] pour la formulation précise.

4.3 Convergence faible du schéma d'Euler

Dans la pratique, la vitesse de convergence forte du schéma de discrétisation d'une diffusion est beaucoup moins importante que celle qui permet d'approximer l'espérance d'une fonction de la diffusion à l'instant T à l'aide de celle de l'espérance du schéma (que l'on peut simuler et dont on peut donc calculer la moyenne empirique). L'exemple suivant montre que la vitesse forte du schéma d'Euler est $1/2$, mais que sa vitesse faible (celle de l'approximation de $E[f(X_T)]$ par $E(f(\bar{X}_T^n))$ est 1. Soit $X_t = 1 + \int_0^t X_s dW_s$; une application immédiate de la formule d'Itô montre que $X_t = \exp(W_t - \frac{t}{2})$. L'exercice 4.1 montre que la vitesse forte de convergence du schéma d'Euler dans cet exemple ne peut pas être supérieure à $1/2$. Par contre, pour $f(x) = x^2$ ou $f(x) = x^3$, un calcul explicite des moments d'ordre 2 ou 3 de X_1 et \bar{X}_1 fournit :

$$E(X_1^2) = E[\exp(2W_1 - 1)] = e \quad \text{et} \quad E(X_1^3) = E\left[\exp\left(3W_1 - \frac{3}{2}\right)\right] = e^3.$$

Si les variables aléatoires $(G_k, k \geq 1)$ sont gaussiennes $\mathcal{N}(0, 1)$ indépendantes, on a :

$$E(|\bar{X}_1^n|^2) = E\left[\prod_{k=1}^n \left(1 + \frac{1}{\sqrt{n}} G_k\right)^2\right] = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n,$$

tandis que

$$E((\bar{X}_1^n)^3) = E\left[\prod_{k=1}^n \left(1 + \frac{1}{\sqrt{n}} G_k\right)^3\right] = \left(1 + \frac{3}{n}\right)^n.$$

Le tableau suivant donne les valeurs de $X = \ln(n)$, $Y = \ln[E(|X_1 - \bar{X}_1|)]$, qui correspond à une approximation forte, et $Z_3 = \ln[|E(\bar{X}_1^3 - e^3)|]$, qui correspond à une approximation faible, obtenues par la méthode de Monte Carlo sur un échantillon de taille $K = 90\,000$, $T_2 = \ln\left[\left(1 + \frac{1}{n}\right)^n - e\right]$ et enfin $T_3 = \ln\left[\left(1 + \frac{3}{n}\right)^n - e^3\right]$ pour $n = 20 + 10k$, $0 \leq k \leq 8$.

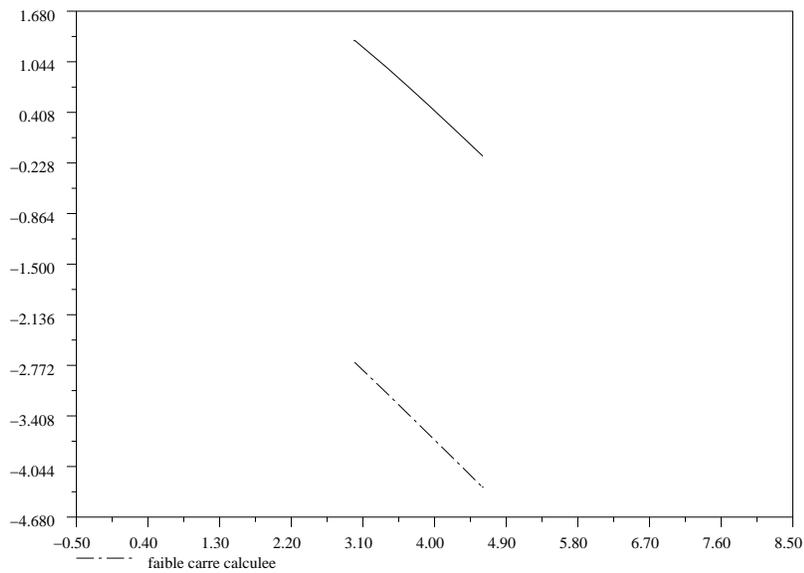
n	X	Y	T_2	Z_3	T_3
20	2.9957323	- 2.0404171	- 2.7336123	1.2517926	1.3134547
30	3.4011974	- 2.2486329	- 3.1244057	0.9497913	0.9693137
40	3.6888795	- 2.4021837	- 3.4046637	0.7830386	0.7135859
50	3.912023	- 2.5113522	- 3.623324	0.5294511	0.5100549
60	4.0943446	- 2.6087408	- 3.8026446	0.3771230	0.3409984
70	4.2484952	- 2.6857551	- 3.9546457	0.2065828	0.1964180
80	4.3820266	- 3.8068414	- 4.0865617	0.1501653	0.0701173
90	4.4998097	- 2.8104988	- 4.2030863	0.0596871	0.0420101
100	4.6051702	- 2.859227	- 4.3074388	- 0.2314346	- 0.1428259

Les coefficients de régression linéaire α de Y en X (resp. Z, T_2 ou T_3 en X) et l'écart type σ de la régression sont donnés par :

	Y en X	T_2 en X	Z_3 en X	T_3 en X
α	- 0.5105131	- 0.9788650	- 0.8709157	- 0.9086548
σ	0.0033108	0.0024575	0.0629701	0.0099577

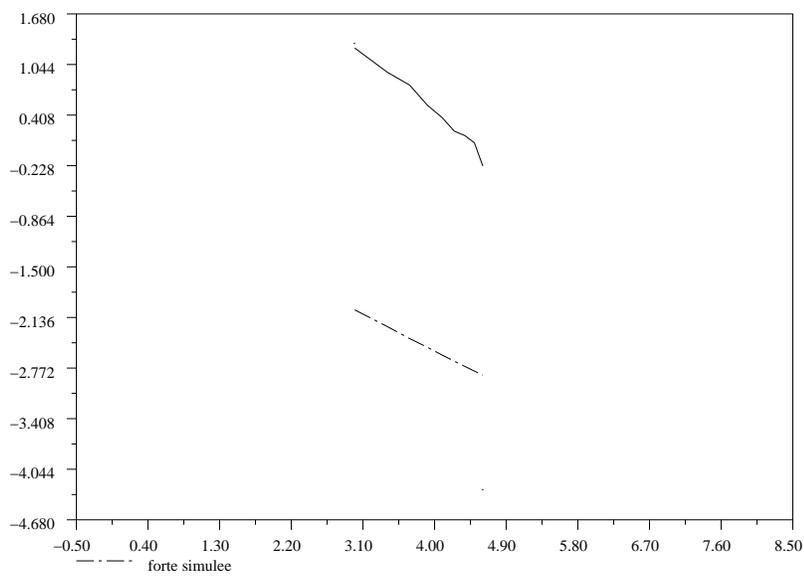
La figure ci-dessous représente les graphiques de (X, T_2) et (X, T_3) .

FIG. 17 – *Vitesse de convergence faible théorique du schéma d'Euler pour x^2 et x^3*



La figure ci-dessous représente les graphiques de (X, Y) et (X, Z_3) .

FIG. 18 – *Vitesse de convergence forte et faible pour x^3 du schéma d'Euler simulé*



Le résultat suivant de D. Talay et L. Tubaro [22] montre que la vitesse de convergence faible du schéma d'Euler est 1, c'est à dire le double de la vitesse forte de ce schéma. La vitesse de convergence faible du schéma de Milstein est également 1 mais la simplicité de simulation du schéma d'Euler fait préférer celui-ci dans ce contexte.

Théorème 4.16 *Soit $\sigma : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{rd}$ et $b : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ des fonctions de classe \mathcal{C}^4 dont les dérivées partielles d'ordre 1 à 4 sont bornées. Pour tout $x \in \mathbb{R}^d$ et $n \geq 1$ soit X la diffusion :*

$$X_t = x + \int_0^t \sigma(X_s) dW_s + \int_0^t b(X_s) ds,$$

et notons X^n soit le schéma d'Euler \bar{X}^n défini par (3.16), soit $X^{(n)}$ l'interpolé du précédent sur les points $\frac{kT}{n}$. Alors pour toute fonction f appartenant à $\mathcal{K}^4(\mathbb{R}^d)$, il existe une constante $C_T(f)$ (qui dépend de T et de f) telle que

$$|E(f(X_T^n)) - E(f(X_T))| \leq C_T(f) n^{-1}. \quad (4.25)$$

Démonstration : D'après la remarque 4.12, $u(t, x) = E(f(X_T) | \mathcal{F}_t)$ est de classe $\mathcal{C}^{2,4}$ et est solution du problème de Cauchy (4.17) avec la condition terminale $u(T, \cdot) = f(\cdot)$. L'équation (4.16) et la formule d'Itô appliquée au schéma d'Euler \bar{X}^n défini par (3.16) montrent que si $a = \sigma \sigma^*$,

$$\begin{aligned} E[f(\bar{X}_T^n) - f(X_T)] &= E[u(T, \bar{X}_T^n) - u(0, x)] \\ &= E \left[\int_0^T \left\{ \frac{\partial u}{\partial t}(t, \bar{X}_t^n) + \sum_{i=1}^d \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, \bar{X}_t^n) b^i(\bar{X}_{\phi_t^n}^n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(t, \bar{X}_t^n) a^{i,j}(\bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right\} dt \right]. \end{aligned}$$

Puisque u est solution de (4.17), le fait que u est de classe $\mathcal{C}^{2,4}$ entraîne que les dérivées partielles de u , $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ et $\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}$ sont de classe $\mathcal{C}^{1,2}$. De plus, puisque u est solution du problème de Cauchy (4.17),

$$\begin{aligned} T_1^n &= \int_0^T E \left[\frac{\partial u}{\partial t}(t, \bar{X}_t^n) - \frac{\partial u}{\partial t}(t, \bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right] dt, \\ T_2^n &= \sum_{i=1}^d \int_0^T E \left[\left\{ \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, \bar{X}_t^n) - \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, \bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right\} b^i(\bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right] dt, \\ T_3^n &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \int_0^T E \left[\left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(t, \bar{X}_t^n) - \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(t, \bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right\} a^{i,j}(\bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right] dt. \end{aligned}$$

Puisque b est à croissance linéaire et que les dérivées partielles de u sont à croissance polynomiale, la formule d'Itô appliquée à la fonction $\frac{\partial u}{\partial t}$ sur l'intervalle $[\phi_t^n, t]$ et l'inégalité (3.18) montrent que :

$$\begin{aligned} |E \left[\frac{\partial u}{\partial t}(t, \bar{X}_t^n) - \frac{\partial u}{\partial t}(t, \bar{X}_{\phi_t^n}^n) \right]| &\leq \left| E \left[\int_{\phi_t^n}^t \left\{ \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x_i}(t, \bar{X}_s^n) b^i(\bar{X}_{\phi_s^n}^n) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^3 u}{\partial t \partial x_i \partial x_j}(t, \bar{X}_s^n) a^{i,j}(\bar{X}_s^n) \right\} ds \right] \right| \\ &\leq C n^{-1}; \end{aligned}$$

nous en déduisons que $|T_1^n| \leq C n^{-1}$ et un calcul similaire pour des termes $|T_2^n|$ et $|T_3^n|$ termine la démonstration. \square

La régularité imposée à la fonction f est gênante en pratique et le théorème peut être amélioré sur ce point, en renforçant les conditions sur les coefficients de la diffusion X ; la démonstration, qui repose sur des techniques de calcul de Malliavin, est omise.

Théorème 4.17 *Supposons que les coefficients σ et b du Théorème 4.16 sont de classe \mathcal{C}^∞ avec des dérivées partielles d'ordre supérieur ou égal à 1 bornées et que le générateur A est uniformément elliptique sur \mathbb{R}^d (c'est à dire que la condition de la définition 4.2 est satisfaite). Alors si f est de classe \mathcal{C}^∞ avec des dérivées partielles à croissance polynomiale, pour tout entier $K \geq 1$ il existe des constantes $C_k, 1 \leq k \leq K$ telles que :*

$$E[f(X_T^n) - f(X_T)] = \sum_{k=1}^K \frac{C_k}{n^k} + O(n^{-(K+1)}).$$

Notons que dans le théorème précédent, la condition d'ellipticité uniforme du générateur A peut être affaiblie.

Remarque 4.18 Notons qu'en utilisant le théorème 4.17 avec $2n$ pas, on peut obtenir une erreur en n^{-2} au lieu de n^{-1} ; c'est l'extrapolation de Romberg. En effet :

$$E[2f(X_T^{2n}) - f(X_T^n)] - E[f(X_T)] = \frac{2C_1}{2n} - \frac{C_1}{n} + \frac{2C_2}{4n^2} - \frac{C_2}{n^2} + O(n^{-3}) = O(n^{-2}).$$

4.4 Exercices.

Exercice 4.1 Soit $(W_t, t \geq 0)$ un mouvement Brownien standard à valeurs dans \mathbb{R} et

$$X_t = 1 + \int_0^t X_s dW_s.$$

1. Écrire le schéma d'Euler \bar{X}_t^n entre les instants 0 et 1 de pas $1/n$ et donner une expression explicite de \bar{X}_1^n en fonction de $\Delta W_i = W_{(i+1)/n} - W_{i/n}$ pour $0 \leq i < n$. Dans la suite, on notera \bar{X}_1 pour \bar{X}_1^n .
2. Montrer que pour presque tout ω il existe $N(\omega)$ tel que pour tout $n \geq N(\omega)$ et tout $i = 0, \dots, n-1$, $|\Delta W_i(\omega)| \leq \frac{1}{2}$.
3. Montrer que pour tout $n \geq N(\omega)$:

$$\ln(\bar{X}_1(\omega)) = W_1(\omega) - \frac{1}{2} + T_1(\omega) + \frac{1}{3}T_2(\omega) + \epsilon_n(\omega),$$

où :

$$T_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \sum_{i=0}^{n-1} \Delta W_i^2 \right), \quad T_2 = \sum_{i=0}^{n-1} \Delta W_i^3 \quad \text{et} \quad |\epsilon_n| \leq C T_3 \quad \text{où} \quad T_3 = \sum_{i=0}^{n-1} \Delta W_i^4.$$

4. Montrer que $E(T_1^6) \leq C n^{-3}$ et que $E(T_2^4) \leq C n^{-4}$. En déduire que pour $0 \leq \alpha < \frac{2}{3}$, quand $n \rightarrow +\infty$:

$$n^\alpha T_1^2 \rightarrow 0 \text{ p.s. et } n^\alpha T_2 \rightarrow 0 \text{ p.s.}$$

5. Montrer qu'il existe une constante C et une variable aléatoire U_3 telles que : $T_3 = \frac{C}{n} + U_3$ et $E(U_3^2) \leq C n^{-3}$. En déduire que si $0 \leq \alpha < 1$, $n^\alpha \epsilon_n \rightarrow 0$ p.s.
6. Montrer que si $(Z_n, n \geq 1)$ est une suite de variables aléatoires positives qui converge en loi vers une variable aléatoire Z qui a une densité, alors pour tout $\varepsilon > 0$, la suite $(n^\varepsilon Z_n)$ converge en probabilité vers $+\infty$ et en déduire que $P(\limsup_n n^\varepsilon Z_n = +\infty) = 1$.
7. Montrer que si $\alpha > \frac{1}{2}$, $\limsup_n n^\alpha T_1 = +\infty$ p.s. et en déduire :

$$P\left(\limsup_n n^\alpha |X_1 - \bar{X}_1| = +\infty\right) \text{ pour } \alpha > \frac{1}{2}.$$

Exercice 4.2 Soit A l'opérateur différentiel défini sur les fonctions de classe \mathcal{C}^2 sur \mathbb{R} par

$$Ag(x) = \frac{1}{2} e^{-2x^2} g'' + x g'.$$

1. Écrire un algorithme de simulation de la diffusion $(X_t, t \geq 0)$ ayant A comme générateur infinitésimal.
2. Écrire un algorithme de simulation du calcul approché de la fonction $g : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ solution du problème de Dirichlet :

$$\begin{cases} Ag(x) - \cos(x) g(x) = \sin(x), & \forall x \in]-1, +1[, \\ g(-1) = g(1) = 1. \end{cases}$$

3. Écrire un algorithme de simulation du calcul approché de la solution $u : [0, +\infty[\times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ du problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = Au(t, x), \\ u(0, x) = \cos(x). \end{cases}$$

4. Écrire un algorithme de simulation du calcul approché de la solution $v : [0, 1] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ du problème de Cauchy :

$$\begin{cases} -\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) = e^{-t} Av(t, x) + \sin(t + x), \\ v(1, x) = \cos(x). \end{cases}$$

Exercice 4.3 Soit A l'opérateur différentiel défini sur les fonctions de classe $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^2)$ pour $x = (x_1, x_2)$ par :

$$\begin{aligned} Af(x) = & (1 + \cos^2 x_1) \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) + 2 \sin(x_1 + x_2) \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) \\ & + (1 + \cos^2 x_2) \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x) + x_1 \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) + x_2 \frac{\partial f}{\partial x_2}(x). \end{aligned}$$

1. Montrer que A est uniformément elliptique sur \mathbb{R}^2 .
2. Soit D le disque unité ouvert de \mathbb{R}^2 . Écrire un algorithme de calcul approché de la solution du problème de Dirichlet :

$$\begin{cases} Ag(x) - (x_1 + x_2)^2 g(x) = e^{-(x_1 + x_2)^2}, & \forall x \in D, \\ g(x) = 1 & \forall x \in \partial D. \end{cases}$$

3. Écrire un algorithme de simulation du calcul approché de la solution du problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = A u(t, x) & , \forall (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}^2, \\ u(0, x) = e^{-(x_1+x_2)^2} & , \forall x \in \mathbb{R}^2. \end{cases}$$

4. On note A_t l'opérateur différentiel défini par

$$A_t f = e^t A f.$$

- (a) Modifier les algorithmes précédents pour résoudre le problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = A_t u(t, x) & , \forall (t, x) \in]0, T] \times \mathbb{R}^2, \\ u(0, x) = \cos((x_1 x_2)) & , \forall x \in \mathbb{R}^2. \end{cases}$$

- (b) Écrire un algorithme de simulation du calcul approché de la solution du problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t}(t, x) = A_t v(t, x) + \cos(t x_1 x_2) u(t, x) + \sin(t x_1 x_2) & , \forall (t, x) \in [0, T[\times \mathbb{R}^2, \\ v(T, x) = 1 & , \forall x \in \mathbb{R}^2. \end{cases}$$

5 Méthode de Monte Carlo

5.1 Introduction

Le but de cette section est de justifier la méthode, d'indiquer la précision qu'elle fournit et les intervalles de confiance que l'on peut obtenir pour les valeurs numériques des intégrales que l'on souhaite évaluer. Cette méthode qui converge « lentement » a comme intérêt d'être « insensible à la dimension » des problèmes étudiés (contrairement à des méthodes classiques d'analyse numérique qui ne sont performantes qu'en « petite dimension ») et à la régularité de la fonction g dont on cherche à calculer l'intégrale $\int_{[0,1]^d} g(x_1, \dots, x_d) dx_1 \cdots dx_d = E[g(U_1, \dots, U_d)]$ lorsque les variables aléatoires $(U_i, 1 \leq i \leq d)$ sont i.i.d. de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$.

La justification théorique de la méthode est la loi forte des grands nombres qui permet de ne faire appel qu'à une réalisation d'un échantillon, c'est à dire à la suite $X_n(\omega)$ pour un seul ω .

Théorème 5.1 *Soit $(X_n = (X_n^k, 1 \leq k \leq d), n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires à valeurs dans \mathbb{R}^d indépendantes de même loi (i.i.d.) intégrables, c'est à dire telles que $\sum_{k=1}^d E|X_1^k| < +\infty$ et $\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$. Alors pour presque tout $\omega \in \Omega$:*

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \bar{X}_n(\omega) = E(X_1)$$

L'hypothèse d'intégrabilité est essentielle, comme le montre l'exemple classique suivant : soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires i.i.d. de loi de Cauchy, c'est à dire de densité $\frac{1}{\pi(1+x^2)}$. Alors $E(|X_1|) = +\infty$ et la fonction caractéristique de X_1 est $E[\exp(itX_1)] = \exp(-|t|)$. On en déduit immédiatement que la fonction caractéristique de \bar{X}_n est également $\exp(-|t|)$, et que \bar{X}_n suit donc une loi de Cauchy pour tout $n \geq 1$ et ne converge pas presque sûrement vers une constante.

La vitesse de convergence est bien sûr un problème crucial pour maîtriser l'erreur commise en approximant la valeur souhaitée $E(X)$ par $\bar{X}_n(\omega)$ que l'on peut simuler. L'inégalité de Bienaymé-Chebychev donne une première estimation très grossière de cette erreur :

Lemme 5.2 *Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires réelles i.i.d. de carré intégrable, c'est à dire telle que $E(|X_1|^2) < +\infty$. Alors si $\text{Var}(X_1) = E(|X_1|^2) - E(X_1)^2$, pour tout $\lambda > 0$:*

$$P(|\bar{X}_n - E(X_1)| \geq \lambda) \leq \frac{\text{Var}(X_1)}{n \lambda^2}. \quad (5.1)$$

Cette inégalité donne de très mauvaises estimations de la probabilité que la moyenne empirique soit « loin » de l'espérance et peut être nettement améliorée par un résultat très simple de grandes déviations sous des hypothèses renforcées d'intégrabilité. Ainsi, lorsque les X_n ont des moments exponentiels, le théorème suivant de Chernov montre que la probabilité que \bar{X}_n appartienne à un intervalle qui ne contient pas $E(X_1)$ converge vers 0 à une vitesse exponentielle. Soit X une variable aléatoire réelle; pour tout $t \in \mathbb{R}$, on note $\Phi_X(t) = \ln [E(e^{tX})]$ la log-Laplace de X et $\mathcal{D}_X = \{t \in \mathbb{R} : \Phi_X(t) < +\infty\}$ le domaine de Φ_X . L'inégalité de Hölder montre que Φ_X est convexe et le théorème de dérivation sous l'intégrale de Lebesgue montre que Φ est dérivable sur l'intérieur de \mathcal{D}_X avec $\Phi'_X(t) = \frac{E(X e^{tX})}{E(e^{tX})}$.

Théorème 5.3 Soit X une variable aléatoire réelle telles que 0 appartient à l'intérieur de \mathcal{D}_X ; on note

$$\Psi_X(x) = \sup\{tx - \Phi_X(t) : t \in \mathbb{R}\} = \sup\{tx - \Phi_X(t) : t \in \mathcal{D}_X\}$$

la transformée de Cramer de X . Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires réelles i.i.d. de même loi que X ; alors pour tout $a < E(X) < b$:

$$P(\bar{X}_n \geq b) \leq e^{-n\Psi_X(b)} \quad \text{et} \quad P(\bar{X}_n \leq a) \leq e^{-n\Psi_X(a)}. \quad (5.2)$$

Démonstration : Soit $b > E(X)$; pour tout $t > 0$ et $n \geq 1$,

$$P(\bar{X}_n \geq b) \leq E(e^{-nbt+tS_n}) = e^{-nbt+n\Phi_X(t)}.$$

On en déduit que

$$P(\bar{X}_n \geq b) \leq \exp(-n \sup\{bt - \Phi_X(t) : t > 0\})$$

Pour prouver l'inégalité (5.2) lorsque $b > E(X)$, il suffit donc de montrer que $\sup\{bt - \Phi_X(t) : t > 0\} = \Psi_X(b)$ dès que $b > E(X)$. Notons g la fonction définie par $g(t) = bt - \Phi_X(t)$ pour tout $t \in \mathcal{D}_X$. Clairement, g est concave et $g(0) = 0$. De plus, puisque 0 appartient à l'intérieur de \mathcal{D}_X , $g'(0) = b - E(X) > 0$. On en déduit que $\sup\{bt - \Phi_X(t) : t > 0\} = \sup\{bt - \Phi_X(t) : t \in \mathcal{D}_X\} = \Psi_X(b)$. Le raisonnement, similaire pour l'intervalle $]-\infty, a[$ avec $a < E(X)$ est laissé comme exercice. \square

Pour obtenir des intervalles de confiance de $E(X_1)$, on utilise le théorème de la limite centrale suivant.

Théorème 5.4 Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires réelles i.i.d. de carré intégrable, $m = E(X_1)$ et $\sigma^2 = \text{Var}(X_1)$. Alors la suite $\frac{\sqrt{n}}{\sigma} (\bar{X}_n - m)$ converge en loi vers une variable N de loi gaussienne centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$.

On en déduit immédiatement le corollaire suivant :

Corollaire 5.5 Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires réelles i.i.d. de carré intégrable d'espérance m et de variance σ^2 . Alors pour toute fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ continue bornée (resp. continue sauf en un nombre fini de points), si N désigne une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} E \left[f \left(\frac{\sqrt{n}}{\sigma} (\bar{X}_n - m) \right) \right] = E(f(N)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

De plus pour tout couple de nombre réels $a < b$, on a

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} P \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}} a \leq \bar{X}_n - m \leq \frac{\sigma}{\sqrt{n}} b \right) = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

Une table de fonction de répartition d'une loi gaussienne centrée réduite montre que si N est $\mathcal{N}(0, 1)$, $P(|N| \leq 1.96) = 0.95$. On en déduit que pour n assez grand,

$$P \left(|\bar{X}_n - E(X_1)| \leq 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right) \sim 0.95,$$

c'est à dire que l'on a un *intervalle de confiance* de $E(X_1)$ à 95% en posant

$$\left[\bar{X}_n - 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{X}_n + 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right]. \quad (5.3)$$

L'ordre de grandeur de l'erreur commise étant $1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, il faut impérativement estimer l'écart type σ s'il est inconnu. C'est le but du résultat suivant :

Théorème 5.6 Soit $(X_i, 1 \leq i \leq n)$ un échantillon de taille n d'une variable aléatoire X de carré intégrable (c'est à dire n variables aléatoires indépendantes de même loi que X). Notons \bar{X}_n la moyenne empirique de cet échantillon; la variance empirique de l'échantillon est

$$\bar{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2 = \frac{n}{n-1} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2 - \bar{X}_n^2 \right). \quad (5.4)$$

Alors $\bar{\sigma}_n^2$ est un estimateur sans biais consistant de σ^2 , c'est à dire que $E(\bar{\sigma}_n^2) = \sigma^2$ et que la suite $\bar{\sigma}_n^2$ converge presque sûrement vers σ^2 quand $n \rightarrow +\infty$.

Le théorème précédent montre que $\bar{\sigma}_n^2$ est très facilement calculé à partir des sommes $\sum_{i=1}^n X_i$ et $\sum_{i=1}^n X_i^2$. De plus, en remplaçant σ par $\bar{\sigma}_n$, on obtient un intervalle de confiance de $E(X_1)$ avec une probabilité proche de 0.95 (quand n est grand) :

$$\left[\bar{X}_n - 1.96 \frac{\bar{\sigma}_n}{\sqrt{n}}, \bar{X}_n + 1.96 \frac{\bar{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \right]. \quad (5.5)$$

Signalons enfin que le Théorème de la Limite Centrale peut parfois être amélioré (par exemple en imposant un peu plus d'intégrabilité). Le théorème suivant donne la vitesse de convergence des fonctions de répartition vers celle de la loi $\mathcal{N}(0, 1)$.

Théorème 5.7 (Berry-Essen) Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires réelles i.i.d. centrées (c'est à dire que $E(X_1) = 0$) et telles que $E(|X_1|^3) < +\infty$. Notons σ^2 la variance de X_1 et pour tout $t \in \mathbb{R}$ notons

$$F(t) = \int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

la fonction de répartition d'une loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$. Pour tout entier $n \geq 1$ et $t \in \mathbb{R}$, notons

$$F_n(t) = P \left(\frac{\sum_{i=1}^n X_i}{\sigma \sqrt{n}} \leq t \right).$$

Alors il existe une constante $C \in [0.398, 0.8]$ telle que

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} |F_n(t) - F(t)| \leq C \frac{E(|X_1|^3)}{\sigma^3 \sqrt{n}}.$$

Les deux exemples suivants montrent les limites pratiques de la méthode.

- On cherche tout d'abord à estimer la probabilité qu'une variable aléatoire appartienne à un ensemble. Cela revient à estimer le paramètre p d'une loi de Bernoulli X pour laquelle $E(X) = p$ et $\text{Var}(X) = p(1-p) < \frac{1}{4}$. Afin que l'erreur $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ soit inférieure à 0.01, il faut donc choisir n de l'ordre de 2500 et l'intervalle de confiance de p donné par le théorème de la limite centrale est donc $[\bar{x}_n - 1.96 \times 10^{-2}, \bar{x}_n + 1.96 \times 10^{-2}]$, ce qui est convenable dans certaines situations. Dans d'autres cas (par exemple dans le cas de second tour d'élections présidentielles assez « serrées »), si on interroge $n = 2\,500$ personnes et que 1 250 déclarent vouloir voter pour chacun des deux candidats, on obtient une erreur beaucoup trop grande, avec un intervalle de confiance $[0.48, 0.52]$ de la proportion p des électeurs qui voteront pour l'un des candidats. Enfin si p est très proche de 0 (ou de 1), comme $\sigma \sim \sqrt{p}$ (resp. $\sim \sqrt{1-p}$), l'erreur relative est de l'ordre de $\frac{2}{\sqrt{pn}}$ et pour estimer p il faut prendre n très grand.

• Dans le second exemple, on cherche à estimer un moment exponentiel d'une variable aléatoire G gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$, par exemple $\epsilon = E[\exp(aG)] = \exp(\frac{a^2}{2})$. Si $(G_n, n \geq 1)$ désigne une suite i.i.d. $\mathcal{N}(0, 1)$ et si on note $\epsilon_n = \frac{\exp(aG_1) + \dots + \exp(aG_n)}{n}$ alors d'après le théorème de la limite centrale, $\epsilon_n - \epsilon \sim \frac{\sigma}{\sqrt{n}} N$ où N suit une loi $\mathcal{N}(0, 1)$. La variance de la variable aléatoire $\exp(aG)$ est $\sigma^2 = \exp(2a^2) - \exp(a^2)$ et l'erreur relative est de l'ordre de $\frac{\sigma}{\epsilon\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{\exp(a^2)-1}{n}}$. Ainsi pour $a = 1$, une erreur relative de 4% nécessite 1 074 tirages, tandis que pour $a = 5$, une erreur relative de 100% nécessite 7.2×10^{10} tirages. Dans ce dernier cas, pour une valeur exacte de 268 337, si la valeur estimée par 10^{10} tirages est 854 267 et l'intervalle de confiance à 95% est $[-557\,029, 2\,265\,563]$.

Ce dernier exemple est relié à deux quantités importantes en finance. Pour une variable aléatoire G gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$, $F(t) = \int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2}) dx$, et des constantes $\beta > 0$ (de l'ordre de 1) et $K > 0$, le call (prix d'une option d'achat) est donné par la formule de Black et Sholes :

$$C = E((e^{\beta G} - K)^+) = e^{\frac{\beta^2}{2}} F\left(\beta - \frac{\ln(K)}{\beta}\right) - K F\left(-\frac{\ln(K)}{\beta}\right);$$

Pour $\beta = K = 1$, on a la valeur « exacte » $C = 0.887$. De plus, $\text{Var}((e^G - 1)^+) \sim 4.16$, d'où $\sigma_C \sim 2.04$.

Le put (prix d'une option de vente) est

$$P = E((K - e^{\beta G})^+) = K F\left(\frac{\ln(K)}{\beta}\right) - e^{\frac{\beta^2}{2}} F\left(\frac{\ln(K)}{\beta} - \beta\right).$$

De nouveau pour $\beta = K = 1$, on a la valeur « exacte » $P = 0,238$, tandis que $\text{Var}((1 - e^G)^+) \sim 0.0885$, d'où $\sigma_P \sim 0.297$. Ceci entraîne que, suivant la taille de l'échantillon, la demi-longueur de l'intervalle de confiance à 95 % de C ou de P est

n	$1.96 \times \frac{\sigma_C}{\sqrt{n}}$	$1.96 \times \frac{\sigma_P}{\sqrt{n}}$
10^2	0.400	5.8×10^{-2}
10^3	0.126	1.8×10^{-2}
10^4	0.040	6×10^{-3}

L'intervalle de confiance du call est donc environ 7 fois plus grand que celui du put et l'approximation du put est donc bien meilleure. Puisque

$$C - P = E(e^{\beta G} - K) = e^{\frac{\beta^2}{2}} - K,$$

on a donc intérêt à calculer le put P par la méthode de Monte-Carlo pour en déduire le call C .

5.2 Réduction de la variance.

Les méthodes proposées seront systématiquement étudiées sur le put (ou le call) précédent.

5.2.1 Échantillonnage préférentiel

Soit X une variable aléatoire (par exemple réelle) de densité f ; on cherche à calculer $E(g(X)) = \int_{\mathbb{R}} g(x) f(x) dx$. Soit \tilde{f} une autre densité sur \mathbb{R} et soit Y une variable aléatoire de densité \tilde{f} . Alors

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

Si on note $Z = \frac{g(Y)f(Y)}{\tilde{f}(Y)}$, le calcul de $E(g(X))$ par l'approximation $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{g(Y_i)f(Y_i)}{\tilde{f}(Y_i)}$ pour une suite (Y_i) i.i.d. de densité \tilde{f} sera plus efficace que par l'approximation $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(X_i)$ pour une suite (X_i) i.i.d. de densité f si $\text{Var}(Z) \ll \text{Var}(g(X))$.

Donnons deux exemples d'utilisation de cette méthode.

Exemple 1. On cherche tout d'abord à calculer $\int_0^1 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx$, ce qui correspond à la fonction $g(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)$ et à la densité f d'une variable aléatoire U de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$. La variance de $g(U)$ est

$$\text{Var}(g(U)) = \int_0^1 \cos^2\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx - \left(\int_0^1 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) dx\right)^2 = \frac{1}{2} - \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sim 9.47 \times 10^{-2}.$$

On remplace la loi de $\mathcal{U}([0, 1])$ par une fonction \tilde{f} telle que le produit fg soit proche de \tilde{f} . Puisque f est constante et que l'on sait simuler une variable aléatoire de densité polynomiale, on prend pour densité \tilde{f} une fonction polynôme paire de degré deux, positive sur $[0, 1]$ et qui vaut 1 en 0 et 0 en 1 ; comme $\int_0^1 (1-x^2) dx = \frac{2}{3}$ on pose $\tilde{f}(x) = \frac{3}{2}(1-x^2) 1_{[0,1]}(x)$. Si Y a pour densité \tilde{f} , la variable aléatoire $Z = \frac{2 \cos\left(\frac{\pi Y}{2}\right)}{3(1-Y^2)}$ a pour espérance $E(g(X)) = \frac{2}{\pi}$ et :

$$\text{Var}(Z) = \frac{2}{3} \int_0^1 \frac{\cos^2\left(\frac{\pi x}{2}\right)}{1-x^2} dx - \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sim 1.0242 \times 10^{-3};$$

on voit que la variance est environ divisée par 100 et que la longueur des intervalles de confiance est donc environ divisée par 10. La fonction de répartition Y est définie pour $t \in [0, 1]$ par $P(Y \leq t) = \frac{3}{2} \int_0^t (1-x^2) dx = \frac{3}{2} \left(t - \frac{t^3}{3}\right)$. L'inverse de la fonction de répartition peut être explicitée par la méthode de Cardan. On peut également simuler la variable Y par la méthode du rejet par rapport à la densité de la loi uniforme U . On gagne ici en précision, mais on perd en temps de calcul.

Exemple 2. Cas des call et des put avec $K = 1$. Pour β de signe quelconque, on cherche à calculer le put

$$P = E((1 - e^{\beta G})^+) = \int_{\mathbb{R}} (1 - e^{\beta x})^+ \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dx.$$

Clairement, $1 - e^{\beta x} \geq 0$ si et seulement si $x < 0$ pour $\beta > 0$ (resp. $x > 0$ si $\beta < 0$) et le changement de variable $y = x^2$ montre que pour tout $\beta \neq 0$:

$$P = \int_0^{+\infty} \frac{(1 - e^{\beta\sqrt{y}})^+ + (1 - e^{-\beta\sqrt{y}})^+}{\sqrt{2\pi y}} \frac{1}{2} e^{-\frac{y}{2}} dy.$$

La fonction $\tilde{f}(y) = \frac{1}{2} e^{-\frac{y}{2}} 1_{]0, +\infty[}(y)$ est la densité d'une variable aléatoire Y de loi exponentielle de paramètre $\frac{1}{2}$ et on a alors :

$$P = E\left(\frac{(1 - e^{\beta\sqrt{Y}})^+ + (1 - e^{-\beta\sqrt{Y}})^+}{\sqrt{2\pi Y}}\right).$$

Le tableau des précisions que l'on obtient pour le put avec $\beta = 1$ et la valeur exacte 0.23842 est :

n	$1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$
10^2	1.05×10^{-2}
10^3	4×10^{-3}
10^4	10^{-3}

On voit que pour 10 000 tirages, l'erreur relative est environ divisée par 6.

On peut aussi directement calculer le call $C = E((e^{\beta G} - K)^+)$ en utilisant la fonction d'importance. On fixe $m \in \mathbb{R}$ et on pose $\tilde{f}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2}\right)$; \tilde{f} est la densité d'une variable aléatoire $Y = G + m$ de loi $\mathcal{N}(m, 1)$. Un calcul facile montre que si G suit une loi $\mathcal{N}(0, 1)$, pour toute fonction borélienne $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ positive ou bornée,

$$E[\phi(G)] = E\left[\phi(G+m) e^{-mG - \frac{m^2}{2}}\right] = E\left[\phi(G+m) e^{-m(G+m) + \frac{m^2}{2}}\right].$$

Il faut donc pour chaque fonction ϕ déterminer une valeur de m telle que la variance de $X_m = \phi(G+m) e^{-m(G+m) + \frac{m^2}{2}}$ soit minimale, en tout cas inférieure à celle de $\phi(G)$. Posons par exemple $\phi(x) = (\exp(\beta x) - K)^+$ avec $\beta, K > 0$ et notons σ_m^2 la variance de X_m dans ce cas; alors :

$$\begin{aligned} \sigma_m^2 &= E\left(\left(e^{\beta(G+m)} - K\right)^+ e^{-2m(G+m) + m^2}\right) - E\left(\left(e^{\beta G} - K\right)^+\right)^2 \\ &= \int_{\frac{\ln(K)}{\beta}}^{+\infty} (e^{\beta y} - K)^2 e^{-my + \frac{m^2}{2}} \frac{e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dy - E\left(\left(e^{\beta G} - K\right)^+\right)^2. \end{aligned}$$

On en déduit que

$$\frac{\partial}{\partial m}(\sigma_m^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{\ln(K)}{\beta}}^{+\infty} (e^{\beta y} - K)^2 (m - y) e^{-my + \frac{m^2}{2} - \frac{y^2}{2}} dy;$$

donc pour $m \leq m_0 = \frac{\ln(K)}{\beta}$, $\frac{\partial}{\partial m}(\sigma_m^2) \leq 0$. On prend donc comme fonction \tilde{f} la densité de $G + m_0$ et lorsque $K \gg 1$, ceci améliore nettement la méthode de Monte-Carlo.

Une généralisation au cas de vecteurs gaussiens est proposée dans l'exercice 5.1.

5.2.2 Variables de contrôle

L'idée de la méthode consiste à trouver une variable aléatoire Y et une constante C telles que $E(X) = E(Y) + C$ avec $\text{Var}(Y) < \text{Var}(X)$. Il faut cependant prendre garde au fait que cette méthode risque de provoquer une augmentation du temps de calcul et arbitrer entre précision et temps d'exécution. On cherche donc à écrire $E(f(X))$ sous la forme :

$$E(f(X)) = E(f(X) - h(X)) + E(h(X))$$

dans le cas où $E(h(X))$ peut être calculé explicitement et $\text{Var}(f(X) - h(X))$ est inférieure à $\text{Var}(f(X))$. On calcule alors $E(f(X) - h(X))$ par la méthode de Monte Carlo. Si par exemple on cherche à calculer $\int_0^1 e^x dx$, comme $e^x \sim 1 + x$ près de 0, on écrit

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

Si U suit une loi $\mathcal{U}([0, 1])$, la variance de e^U vaut $\frac{1}{2}(e^2 - 1) - (e - 1)^2 \sim 0.242$ tandis que la variance de $e^U - 1 - U$ vaut $\frac{1}{2}e^2 - 2e + \frac{11}{6} - (e - \frac{5}{2})^2 \sim 0.0436$; elle donc divisée par 5 environ.

Comme nous l'avons remarqué à la fin de la section 5.1, si on cherche à calculer le call C , il est préférable de calculer le put P et d'écrire $C = P + e^{\frac{\beta^2}{2}} - K$.

5.2.3 Variables antithétiques.

Pour dégager l'idée de la méthode, commençons par l'exemple simple suivant : on cherche à calculer $I = \int_0^1 f(x) dx$. Si U est une variable aléatoire de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, $1 - U$ suit également une loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, et on a donc

$$\int_0^1 f(x) dx = E \left[\frac{1}{2} (f(U) + f(1 - U)) \right].$$

On en déduit que si les variables aléatoires $(U_i, i \geq 1)$ sont i.i.d. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, on peut approximer l'intégrale I par

$$\tilde{I}_{2n} = \frac{1}{2n} [f(U_1) + f(1 - U_1) + \cdots + f(U_n) + f(1 - U_n)].$$

La méthode de Monte Carlo usuelle ferait approximer I par

$$I_{2n} = \frac{1}{2n} [f(U_1) + f(U_2) + \cdots + f(U_{2n-1}) + f(U_{2n})].$$

De façon évidente, $\text{Var}(I_{2n}) = \frac{1}{2n} \text{Var}(f(U_1))$. D'autre part

$$\begin{aligned} \text{Var}(\tilde{I}_{2n}) &= \frac{1}{n} \text{Var} \left(\frac{1}{2} [f(U_1) + f(1 - U_1)] \right) \\ &= \frac{1}{4n} \left[\text{Var}(f(U_1)) + \text{Var}(f(1 - U_1)) + 2\text{Cov}(f(U_1), f(1 - U_1)) \right] \\ &= \frac{1}{2n} \left[\text{Var}(f(U_1)) + \text{Cov}(f(U_1), f(1 - U_1)) \right] \end{aligned}$$

On en déduit que si les variables aléatoires $f(U_1)$ et $f(1 - U_1)$ sont négativement corrélées, c'est à dire si $\text{Cov}(f(U_1), f(1 - U_1)) \leq 0$, $\text{Var}(\tilde{I}_{2n}) \leq \text{Var}(I_{2n})$. La méthode se généralise en dimension d quelconque. Si les composantes du vecteur $U = (U_1, \dots, U_d)$ sont des variables aléatoires i.i.d. de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, la transformation $(U_1, \dots, U_d) \rightarrow (1 - U_1, \dots, 1 - U_d)$ laisse la loi du vecteur U invariante. Plus généralement, soit (X_1, \dots, X_{2n}) un $2n$ -échantillon de la variable aléatoire X à valeurs dans \mathbb{R}^d telle qu'il existe une transformation $T : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ pour laquelle les lois de X et de $T(X)$ sont les mêmes. L'estimateur

$$\tilde{I}_{2n} = \frac{1}{2n} \sum_{j=1}^n [f(X_j) + f(T(X_j))]$$

est tel que si $\text{Cov}(f(X), f(T(X))) \leq 0$, alors la variance de \tilde{I}_{2n} est inférieure ou égale à celle de $I_{2n} = \frac{1}{2n} \sum_{j=1}^{2n} f(X_j)$.

La proposition suivante montre que sous des conditions de monotonie de f , les variables aléatoires $f(X)$ et $f(T(X))$ sont négativement corrélées.

Proposition 5.8 *Soit (X_1, \dots, X_n) des variables aléatoires i.i.d. de même loi à valeurs dans \mathbb{R} $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ des fonctions telles que pour chaque $i \in \{1, \dots, n\}$ les fonctions $x_i \rightarrow f(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$ et $x_i \rightarrow g(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$ soient toutes croissantes (resp. décroissantes) pour tout $\hat{x}_i = (x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n)$. Alors*

$$E[f(X_1, \dots, X_n) g(X_1, \dots, X_n)] \geq E[f(X_1, \dots, X_n)] E[g(X_1, \dots, X_n)]. \quad (5.6)$$

Démonstration : Soit $n = 1$. Nous supposons que les fonctions f et g sont croissantes par rapport à chaque argument ; le raisonnement est similaire dans le cas où elles sont décroissantes. Soit X et Y des variables aléatoires réelles ; la croissance de f et g entraîne que

$$E[(f(X) - f(Y))(g(X) - g(Y))] \geq 0.$$

On en déduit que

$$E[f(X)g(X)] + E[f(Y)g(Y)] \geq E[f(X)g(Y)] + E[f(Y)g(X)];$$

en choisissant une variable aléatoire Y indépendante de X et de même loi, on en déduit que

$$E[f(X)g(X)] \geq E[f(X)]E[g(X)].$$

Supposons l'inégalité (5.6) vraie pour $n - 1 \geq 1$ et montrons-la pour n . L'indépendance des variables aléatoires X_i , $1 \leq i \leq n$ entraîne que pour toute fonction $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$,

$$E[h(X_1, \dots, X_n) | X_n] = H(X_n) \quad \text{avec} \quad H(x) = E[h(X_1, \dots, X_{n-1}, x)].$$

Notons $E[f(X_1, \dots, X_n) | X_n] = \phi(X_n)$ et $E[g(X_1, \dots, X_n) | X_n] = \psi(X_n)$. L'hypothèse de récurrence entraîne que pour tout x ,

$$E[f(X_1, \dots, X_{n-1}, x)g(X_1, \dots, X_{n-1}, x)] \geq \phi(x)\psi(x).$$

On en déduit que $E[f(X_1, \dots, X_n)g(X_1, \dots, X_n) | X_n = x] \geq \phi(x)\psi(x)$, d'où :

$$E[f(X_1, \dots, X_n)g(X_1, \dots, X_n)] \geq E[\phi(X_n)\psi(X_n)].$$

Puisque les fonctions $f((X_1(\omega), \dots, X_{n-1}(\omega), \cdot))$ et $g(X_1(\omega), \dots, X_{n-1}(\omega), \cdot)$ ont la même monotonie par rapport à la n -ième variable pour tout $(X_1(\omega), \dots, X_{n-1}(\omega))$, les fonctions ϕ et ψ ont la même monotonie et on conclut grâce à (5.6) appliqué avec $n = 1$. \square

En appliquant cette proposition avec $n = 1$ et $g = -f \circ T$, on déduit immédiatement le corollaire suivant :

Corollaire 5.9 *Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction monotone, $T : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction décroissante et X une variable aléatoire réelle telle que les variables aléatoires $T(X)$ et X ont même loi. Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires i.i.d. de même loi que X . Alors pour tout $n \geq 1$:*

$$\text{Var} \left(\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n [f(X_i) + f(T(X_i))] \right) \leq \text{Var} \left(\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{2n} f(X_i) \right).$$

Ce corollaire montre que si f est monotone, en choisissant $1 - U$ quand U suit une loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, les variables aléatoires $f(U)$ et $f(1 - U)$ sont négativement corrélées. L'exemple suivant reprend l'étude du put $P = E[(K - e^{\beta G})^+]$. La transformation $T(x) = -x$ est décroissante et laisse invariante la loi de la gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ et la fonction $f(x) = (K - e^{\beta x})^+$ est décroissante si $\beta > 0$ et croissante si $\beta < 0$. On en déduit que $\frac{1}{2}[(K - e^{\beta G})^+ + (K - e^{-\beta G})^+]$ a une variance inférieure à celle de $(K - e^{\beta G})^+$.

5.2.4 Méthode de stratification

Cette méthode est classique dans la théorie des sondages. On veut calculer $I = E(g(X)) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) f(x) dx$ où X est une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^d de densité f . On introduit une partition de $(A_i, 1 \leq i \leq m)$ de \mathbb{R}^d et on pose $p_i = P(X \in A_i)$ et $I_i = E(g(X) | X \in A_i)$ pour $1 \leq i \leq m$; alors

$$I = \sum_{i=1}^m E(g(X) | X \in A_i) P(X \in A_i) = \sum_{i=1}^m p_i I_i.$$

On approxime I_i par la moyenne empirique \hat{I}_i d'un échantillon de taille n_i de la loi conditionnelle de X sachant $X \in A_i$ et on note $\sigma_i^2 = \text{Var}(g(X) | X \in A_i)$. L'estimateur considéré de I est

$$\hat{I} = \sum_{i=1}^m p_i \hat{I}_i$$

est sans biais et convergent si chaque n_i tend vers $+\infty$ quand $n \rightarrow +\infty$. Si les estimateurs \hat{I}_i , $1 \leq i \leq m$ sont indépendants, la variance de \hat{I} est

$$\text{Var}(\hat{I}) = \sum_{i=1}^m \frac{p_i^2 \sigma_i^2}{n_i}.$$

Si on dispose au total de $n = \sum_{i=1}^m n_i$ simulations, le minimum de $\text{Var}(\hat{I})$ sous la contrainte $\sum_{i=1}^m n_i = n$ est réalisé lorsque $n_i = c \sigma_i p_i$, soit pour

$$n_i = n \frac{p_i \sigma_i}{\sum_{j=1}^d p_j \sigma_j}, \quad 1 \leq i \leq m$$

et vaut

$$\text{Var}(\hat{I}) = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^m p_i \sigma_i \right)^2.$$

Pour la comparer à la variance de la moyenne empirique des $g(X_i)$ pour un échantillon de taille n , calculons la variance de $g(X)$;

$$\text{Var}(g(X)) = E(g(X)^2) - E(g(X))^2 = \sum_{i=1}^m p_i E(g(X)^2 | X \in A_i) - \left(\sum_{i=1}^m p_i E(g(X) | X \in A_i) \right)^2.$$

En introduisant les variances conditionnelles et en utilisant deux fois la convexité de la fonction $x \rightarrow x^2$ et le fait que $\sum_{i=1}^m p_i = 1$ (c'est à dire l'inégalité de Schwarz pour la probabilité p_i), nous déduisons que

$$\begin{aligned} \text{Var}(g(X)) &= \sum_{i=1}^m p_i \sigma_i^2 + \sum_{i=1}^m p_i E(g(X) | X \in A_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^m p_i E(g(X) | X \in A_i) \right)^2 \\ &\geq \sum_{i=1}^m p_i \sigma_i^2 \geq \left(\sum_{i=1}^m p_i \sigma_i \right)^2. \end{aligned}$$

On en déduit que la variance de \hat{I}_n est inférieure ou égale à celle de $\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n g(X_j)$. Cependant, le choix optimal de n_i demande de connaître les variances conditionnelles σ_i^2 , ce qui n'est pas

toujours le cas ; on peut alors les estimer par une méthode de Monte Carlo. Il faut prendre garde au fait qu'un « mauvais » choix des n_i peut augmenter la variance. Remarquons cependant que le choix $n_i = n p_i$, s'il n'est pas optimal, diminue toujours la variance. En effet dans ce cas

$$\text{Var}(\hat{I}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^m p_i \sigma_i^2 \leq \frac{1}{n} \text{Var}(g(X)) = \text{Var}\left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n g(X_j)\right).$$

Dans l'exemple du calcul d'un call $C = E((e^{\beta G} - K)^+)$, en posant $d = \frac{\ln(K)}{\beta}$, il est naturel d'introduire $A_1 =]-\infty, d[$ et $A_2 = [d, +\infty[$. Dans ce cas $\sigma_1 = 0$ et les n points sont donc affectés pour le calcul de \hat{I}_2 .

D'un point de vue pratique, il est important de savoir simuler dans les diverses zones A_i sans faire appel à la méthode du rejet, mais plutôt par inverse de la fonction de répartition (c'est possible dans le cas du call en se référant à une fonction de répartition tabulée en dimension 1, mais dans ce cas les simulations sont inutiles ...). Le choix de la partition est délicat, sauf dans des cas concrets où elle est imposée par le modèle (géographie, sexe, ...).

5.2.5 Valeur moyenne ou conditionnement

L'idée consiste à conditionner X par une variable aléatoire Y , ce qui laisse l'espérance inchangée mais diminue la variance puisque l'espérance conditionnelle contracte la norme L^2 . Ainsi

$$E(X) = E(E(X|Y)) \quad \text{et} \quad \text{Var}(E(X|Y)) \leq \text{Var}(X).$$

La difficulté réside bien sûr dans l'expression explicite de la fonction $\phi(y) = E(X|Y=y)$ telle que $E(X|Y) = \phi(Y)$. Dans le cas particulier où $X = f(Y, Z)$ avec Y, Z indépendantes :

$$E(f(Y, Z)|Y=y) = E(f(y, Z)).$$

Par exemple, si l'on veut calculer $P(X \leq Y)$ pour deux variables aléatoires X et Y indépendantes, on a

$$P(X \leq Y) = E(F(Y))$$

où F est la fonction de répartition de X ; il faut alors pouvoir calculer F explicitement, mais la réduction de variance peut être importante quand la probabilité $P(X \leq Y)$ est petite.

5.3 Exercices

Exercice 5.1 Notons $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire et $|\cdot|$ la norme euclidienne dans \mathbb{R}^d . Soit $X = (X_1, \dots, X_d)$ un vecteur gaussien centré de matrice de covariance la matrice Id . Pour tout vecteur $m \in \mathbb{R}^d$ et toute fonction borélienne $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ positive ou bornée, soit $X_m = \phi(X + m) \exp\left(-\langle m, X \rangle - \frac{|m|^2}{2}\right)$, et σ_m^2 la variance de X_m .

1. Montrer que pour tout $i = 1, \dots, d$,

$$\frac{\partial}{\partial m_i}(\sigma_m^2) = E\left(\phi^2(X) e^{-\langle m, X \rangle + \frac{|m|^2}{2}} (m_i - X_i)\right).$$

2. Soit $\lambda_i, \beta_i, 1 \leq i \leq d$ et K des constantes strictement positives, $m_i(a) = a \lambda_i \beta_i$ et $\phi(X) = \left(K - \sum_{i=1}^d \lambda_i e^{\beta_i X_i}\right)^+$. Montrer que si $\sum_{i=1}^d \lambda_i > K$,

$$\frac{\partial}{\partial a} \sigma_{m(a)}^2 \geq 0 \quad \text{pour} \quad \frac{K - \sum_{i=1}^d \lambda_i}{\sum_{i=1}^d (\lambda_i \beta_i)^2} \leq a \leq 0$$

et en déduire que pour $M_i = \beta_i \lambda_i \frac{K - \sum_{i=1}^d \lambda_i}{\sum_{i=1}^d (\lambda_i \beta_i)^2}$, on a $\sigma_M^2 \leq \sigma_0^2$.

Exercice 5.2 Soit $(X_n, n \geq 1)$ et $(Y_n, n \geq 1)$ des suites indépendantes de variables aléatoires i.i.d. de même loi que la variable aléatoire X à valeurs dans \mathbb{R}^d , $f, g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. On cherche à calculer $E(f(X) - g(X))$ et on pose

$$\hat{I}_n^1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [f(X_i) - g(Y_i)] \quad \text{et} \quad \hat{I}_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [f(X_i) - g(X_i)].$$

Calculer les variances de \hat{I}_n^1 et \hat{I}_n^2 . Dans quel cas vaut-il mieux utiliser \hat{I}_n^2 ?

Exercice 5.3 Soit X une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$, F la fonction de répartition d'une variable $\mathcal{N}(0, 1)$, $K > 0$ et $d = \frac{m - \ln(K)}{\sigma}$.

1. Montrer que

$$E(1_{\{X \geq \ln(K)\}} e^X) = e^{m + \frac{\sigma^2}{2}} F(d + \sigma).$$

2. Montrer la formule de Black et Sholes :

$$E[(e^X - K)^+] = e^{m + \frac{\sigma^2}{2}} F(d + \sigma) - K F(d).$$

Exercice 5.4 Soit X et Y des variables aléatoires réelles indépendantes, F la fonction de répartition de X et G la fonction de répartition de Y . On veut calculer

$$p = P(X + Y \leq t)$$

par la méthode de Monte Carlo.

1. Donner une procédure de réduction de variance basée sur la méthode de conditionnement.
2. On suppose que F et G sont connues, au moins numériquement. Expliquer comment implémenter une méthode de variables antithétiques et pourquoi elle diminue la variance dans ce cas.
3. Soit h une fonction telle que $\int_0^1 |h(x)|^2 dx < +\infty$. Soit $(U_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires i.i.d. de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$. Montrer que

$$\text{Var} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h \left(\frac{i-1 + U_i}{n} \right) \right) \leq \text{Var} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(U_i) \right).$$

Exercice 5.5 On cherche à calculer l'intégrale $I = \int_0^2 x^2 dx$ par diverses méthodes. Implémenter les méthodes proposées pour diverses tailles d'échantillon, calculer la valeur approchée correspondante de I (vérifier qu'elle converge bien vers $\frac{8}{3}$), la variance empirique dans chaque cas (vérifier qu'elle converge bien vers la variance théorique que l'on calculera dans chaque cas), donner un intervalle de confiance correspondant et, pour chaque méthode, déterminer le temps de calcul et le nombre moyen de tirages d'une loi uniforme consommés suivant la taille de l'échantillon utilisé. En déduire la méthode qui vous semble la plus efficace.

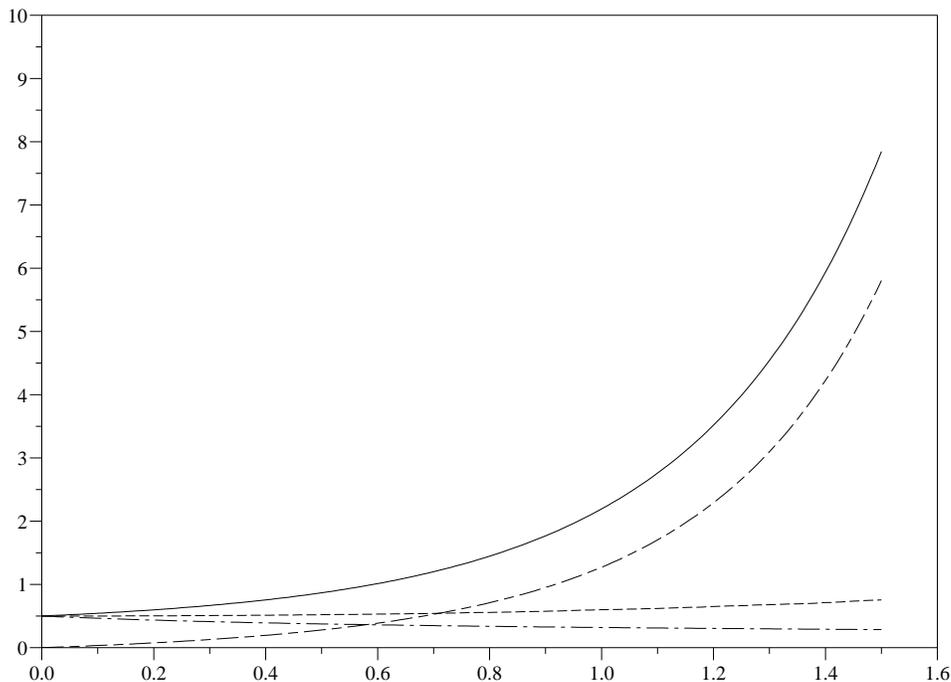
1. Méthode de rejet sur l'ensemble $R = [0, 2] \times [0, 4]$; la variance théorique est $8^2 \frac{1}{3} \frac{2}{3} \sim 14, 22$.
2. Méthode de rejet sur l'ensemble $A = ([0, 1] \times [0, 1]) \cup ([1, 2] \times [0, 4])$; la variance théorique est $5^2 \frac{8}{15} \frac{7}{15} \sim 6, 22$.

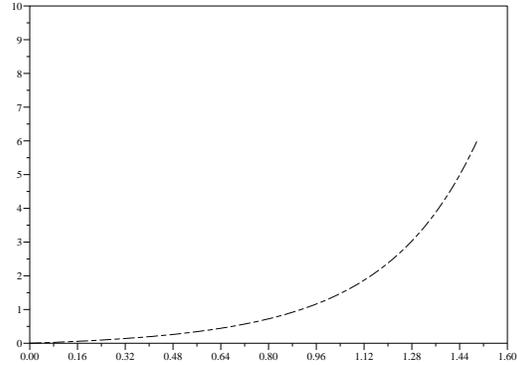
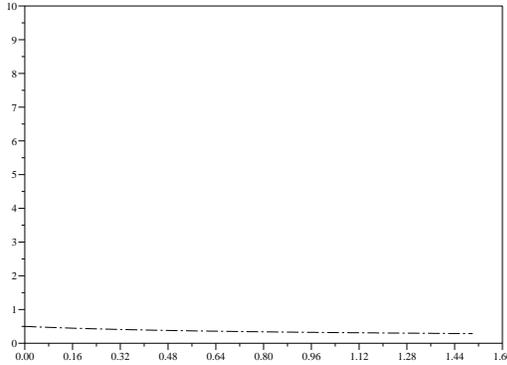
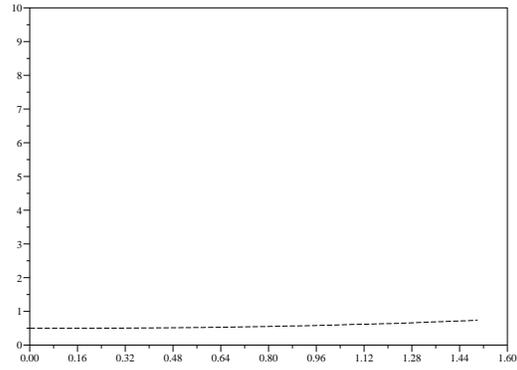
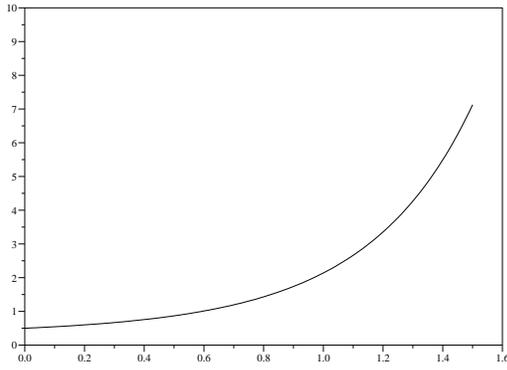
3. Espérance d'une fonction de la variable aléatoire X de densité $\frac{1}{2} 1_{[0,2]}(x)$; la variance théorique est $\frac{256}{45} \sim 5,69$.
4. Espérance d'une fonction de la variable aléatoire X de densité $\frac{x}{2} 1_{[0,2]}(x)$; la variance théorique est $\frac{8}{9} \sim 0,89$.
5. Variables antithétiques avec la variable aléatoire de loi uniforme sur $[0, 2]$ et la transformation $T(x) = 2 - x$; la variance théorique est $\frac{16}{45} \sim 0,36$.

Exercice 5.6 Soit X une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$ et $t > 0$. On cherche à estimer l'intégrale $I(t) = E(e^{tX} 1_{\{X>0\}})$ par une méthode de Monte Carlo en utilisant un échantillon de taille N de loi $\mathcal{N}(0, 1)$.

1. Écrire et implémenter un programme pour le calcul direct de $I(t)$ pour les valeurs de $t = \frac{n}{100}$ pour un entier n compris entre 0 et 150.
2. En reliant $I(t)$ et $P(X \in [t, t+1])$, écrire et implémenter un second programme permettant de calculer $I(t)$ par une méthode de Monte Carlo pour les mêmes valeurs de t .
3. Proposer une méthode de variable de contrôle. Écrire et implémenter un programme permettant de calculer $I(t)$ pour les mêmes valeurs de t par cette méthode.
4. Proposer une méthode de variables antithétiques. Écrire et implémenter un programme permettant de calculer $I(t)$ pour les mêmes valeurs de t par cette méthode.
5. Tracer des graphiques permettant de visualiser l'écart-type empirique de chaque méthode pour ces valeurs de t puis tracer dans une même fenêtre les graphes de ces quatre fonctions lorsque $N = 10\,000$.

Les figures suivantes donnent dans l'ordre la figure traçant les quatre graphes simultanément, puis séparément de gauche à droite (et de haut en bas) les graphes des écarts-types des méthodes proposées dans les questions 1, 2, 3, 4. Quelle conclusion en tirez-vous ?





Exercice 5.7 Soit $(U_i, 1 \leq i \leq n)$ un échantillon de loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ et $V_1 \leq V_2 \leq \dots \leq V_n$ l'échantillon ordonné. On pose par convention $V_0 = 0$ et $V_{n+1} = 1$. Pour $i = 0, \dots, n$, on pose $\Delta_i = V_{i+1} - V_i$.

1. Calculer la loi du couple (V_i, V_{i+1}) pour $i = 1, \dots, n - 1$ puis trouver la loi de Δ_i pour $i = 0, \dots, n$.
2. Montrer que la suite $(\sup_{0 \leq i \leq n} \Delta_i, n \geq 1)$ converge vers 0 p.s.
3. Soit $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue. Montrer que l'estimateur $Z_n = \sum_{i=0}^n \Delta_i f(V_i)$

converge p.s. vers $I = \int_0^1 f(x) dx$.

4. Montrer que la suite $(E(Z_n), n \geq 1)$ converge vers I .
5. On suppose de plus que f est de classe \mathcal{C}^1 . Montrer qu'il existe une constante $C > 0$ telle que

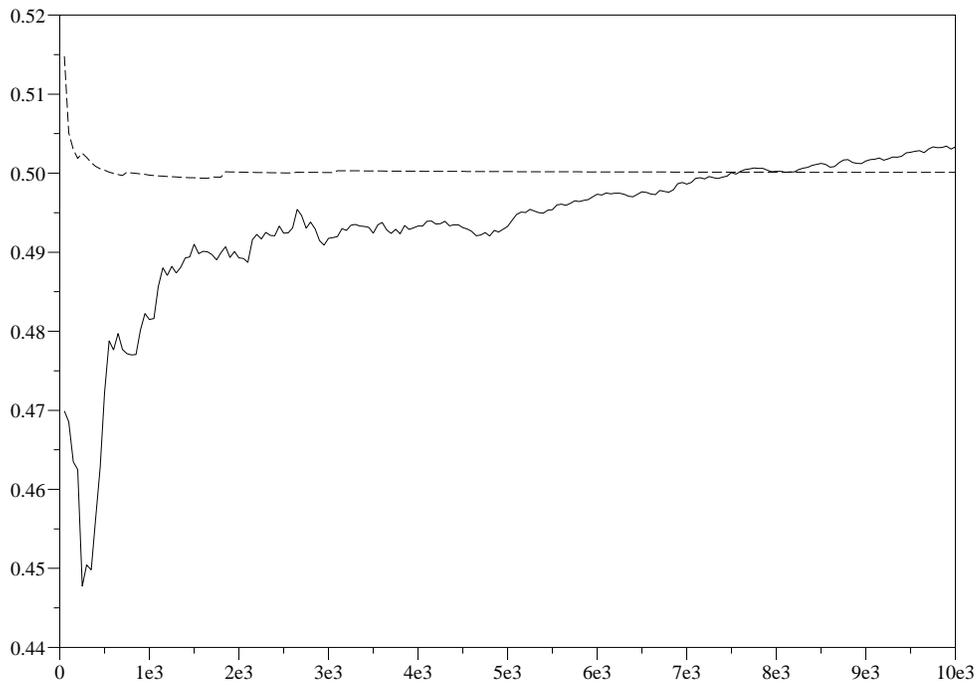
$$|Z_n - I| \leq C \sum_{i=0}^n \Delta_i^2.$$

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

6. Peut-on espérer la même vitesse pour l'estimateur usuel $Y_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(U_i)$?

La figure suivante compare les graphes de (Y_n) et (Z_n) pour des valeurs de n qui sont des multiples de 50 et la fonction $f(x) = x$ en utilisant un échantillon de taille $N = 10\,000$ de loi

uniforme. On remarquera que le graphe de Z_n est beaucoup plus régulier que celui de Y_n et que la suite $(Z_n, n \geq 1)$ converge plus rapidement vers $1/2$.



6 Méthode de Monte Carlo et chaînes de Markov.

6.1 Mesures invariantes et Théorème ergodique.

Dans toute cette section, Q est une matrice de transition sur un ensemble fini (ou dénombrable) d'états \mathbb{E} et $(X_n, n \geq 0)$ désigne une chaîne de Markov de matrice de transition Q . Si $x \in \mathbb{E}$, on notera X_n^x une chaîne Markov d'état initial x , c'est à dire telle que $X_0 = x$. Rappelons qu'une mesure Π sur l'ensemble des états \mathbb{E} est invariante si $\Pi Q = \Pi$. Dans la suite, nous nous intéresserons au cas où la chaîne admet une unique probabilité invariante, ce qui nécessite d'imposer l'irréductibilité de la matrice Q (cf. Exercice 3.9). Rappelons que dans ce cas, tous les états sont récurrents (on dit que la chaîne est récurrente) ou bien tous les états sont transitoires (on dit que la chaîne est transitoire). Si la chaîne est transitoire, $\sum_{n \geq 0} 1_{\{X_n^x=y\}} < +\infty$ pour tout $x, y \in \mathbb{E}$. Ainsi, une marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z}^d est récurrente si $d = 1, 2$ et transitoire si $d \geq 3$, tandis que si \mathbb{E} est fini, toute marche aléatoire irréductible est récurrente irréductible. Le théorème suivant « remplace » la loi des grands nombres valable dans le cas de suites i.i.d.

Théorème 6.1 (Théorème ergodique) *Soit Q une probabilité de transition irréductible ; on suppose qu'il existe une probabilité invariante Π . Alors :*

- (i) Π est l'unique probabilité invariante et $\Pi(x) > 0$ pour tout $x \in \mathbb{E}$.
- (ii) Tous les états sont récurrents.
- (iii) Pour tout état $x \in \mathbb{E}$ et toute fonction $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $\int_{\mathbb{E}} |f(x)| d\Pi(x) < +\infty$:

$$\lim_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k^x) = \int_{\mathbb{E}} f(y) d\Pi(y) \quad p.s. \quad (6.1)$$

Démonstration : (i) Puisque Π est une probabilité, il existe un état $x \in \mathbb{E}$ tel que $\Pi(x) > 0$. L'irréductibilité entraîne que pour tout $y \in \mathbb{E}$, $y \neq x$, il existe un entier $n \geq 1$ tel que $Q^n(x, y) > 0$; de plus

$$\Pi(y) = (\Pi Q^n)(y) \geq \Pi(x) Q^n(x, y) > 0.$$

Montrons que Π est l'unique probabilité invariante ; soit $\bar{\Pi}$ une probabilité invariante, et $\Pi' = \Pi \wedge \bar{\Pi}$. Alors, Π' est une mesure positive telle que $\Pi' Q \leq \Pi Q = \Pi$ et $\Pi' Q \leq \bar{\Pi} Q = \bar{\Pi}$, soit $\Pi' Q \leq \Pi'$. La mesure $\Delta = \Pi - \Pi'$ est donc positive, telle que $\Delta Q \geq \Delta$ et d'après le théorème de Fubini, $\sum_y (\Delta Q)(y) = \sum_x \Delta(x) \sum_y Q(x, y) = \sum_x \Delta(x)$. On en déduit que Δ est invariante, positive de masse totale inférieure ou égale à 1. D'après ce qui précède, soit Δ est identiquement nulle, soit elle charge tous les états. Si Δ est identiquement nulle, on en déduit que $\Pi \leq \bar{\Pi}$ et dans l'autre cas, on a $\Pi(x) > \bar{\Pi}(x)$ pour tout état $x \in \mathbb{E}$. Comme les masses totales de Π et $\bar{\Pi}$ sont toutes les deux égales à un, la seconde possibilité est exclue, ce qui entraîne que $\Pi \leq \bar{\Pi}$. En échangeant les rôles de Π et $\bar{\Pi}$, on en déduit que $\bar{\Pi} \leq \Pi$, ce qui conclut la démonstration de (i).

(ii) Supposons que tous les états sont transitoires. Alors $\sum_n 1_{\{X_n^x=y\}} < +\infty$ p.s. pour tout couple d'états x et y , d'où $\lim_n 1_{\{X_n^x=y\}} = 0$ p.s. Le théorème de convergence dominée entraîne donc que $\lim_n Q^n(x, y) = 0$, puis que

$$\Pi(y) = \lim_n \sum_{x \in \mathbb{E}} \Pi(x) Q^n(x, y) = 0$$

ce qui contredit (i). La chaîne est donc récurrente irréductible.

(iii) Nous ne montrerons (iii) que lorsque f est bornée et esquisserons seulement cette démonstration lorsque la chaîne est récurrente irréductible; les détails techniques peuvent par exemple être trouvés dans [4].

Montrons tout d'abord (iii) lorsque $f = 1_{\{y\}}$. Soit x l'état initial (récurrent) de la chaîne, c'est à dire que $X_0 = x$; pour tout état y , notons $T_x^0 = 0$ et pour tout entier $k \geq 1$,

$$T_x^k(\omega) = \inf \{n > T_x^{k-1}(\omega) : X_n^x(\omega) = x\} \quad \text{et} \quad N_{x,y}^k = \sum_{T_x^{k-1} \leq n < T_x^k} 1_{\{X_n^x=y\}}.$$

Pour tout $k \geq 0$ les temps d'arrêt T_x^k sont presque sûrement finis et la suite de variables aléatoires $(N_{x,y}^k, k \geq 1)$ est indépendante, équidistribuée et intégrable. De plus, $\mu_x(y) = E(N_{x,y}^1)$ définit une mesure strictement positive invariante, c'est à dire telle que $\mu_x Q = \mu_x$ et $\mu_x(y) > 0$ pour tout $y \in \mathbb{E}$; cette mesure invariante est donc unique à une constante multiplicative près. Puisque la chaîne admet une probabilité invariante Π , μ_x est finie est un multiple de Π . De plus, la définition de $\mu_x(y) = E(N_{x,y}^1)$ entraîne que $\Pi(y) \geq \Pi(x) \mu_x(y)$ pour tout $y \in \mathbb{E}$, tandis que $\mu_x(x) = 1$. La mesure positive invariante $\Pi(\cdot) - \pi(x) \mu_x(\cdot)$, qui s'annule en x , est donc identiquement nulle et pour tout $y \in \mathbb{E}$, $\mu_x(y) = \frac{\Pi(y)}{\Pi(x)}$.

D'après la loi forte des grands nombres,

$$\frac{1}{l} \sum_{k=1}^l N_{x,y}^k = \frac{1}{l} \sum_{0 \leq n < T_x^l} 1_{\{X_n=y\}} \rightarrow \mu_x(y) = E(N_{x,y}^1)$$

presque sûrement quand $l \rightarrow +\infty$. Notons L_k le nombre de passages en x avant l'instant k , soit $L_k = \sum_{n < k} 1_{\{X_n=x\}}$. Alors, si $T_x^j(\omega) < k \leq T_x^{j+1}(\omega)$, $L_k(\omega) = j + 1$ et $L_k(\omega) \rightarrow +\infty$ p.s. puisque x est récurrent. Pour tout entier k tel que $T_x^j(\omega) < k \leq T_x^{j+1}(\omega)$ on a donc :

$$\sum_{n < j} N_{x,y}^n(\omega) = \sum_{n < T_x^j(\omega)} 1_{\{X_n(\omega)=y\}} \leq \sum_{n < k} 1_{\{X_n(\omega)=y\}} \leq \sum_{n < T_x^{j+1}(\omega)} 1_{\{X_n(\omega)=y\}} = \sum_{n < j+1} N_{x,y}^n(\omega).$$

Donc pour tout $k \geq 1$,

$$\frac{1}{L_k} \sum_{n < L_{k-1}} N_{x,y}^n \leq \frac{\sum_{n < k} 1_{\{X_n=y\}}}{\sum_{n < k} 1_{\{X_n=x\}}} \leq \frac{1}{L_k} \sum_{n < L_k} N_{x,y}^n.$$

Les deux termes extrêmes de l'inégalité précédente convergent presque sûrement vers $\mu_x(y)$, et il en est donc de même pour le quotient $\frac{\sum_{n < k} 1_{\{X_n=y\}}}{\sum_{n < k} 1_{\{X_n=x\}}}$. Puisque $\sum_{y \in \mathbb{E}} \sum_{n < k} 1_{\{X_n^x=y\}} = k$, on en déduit que $\frac{\sum_{n < k} 1_{\{X_n=x\}}}{k} \rightarrow \Pi(x)$ p.s., puis que $\frac{\sum_{n < k} 1_{\{X_n=y\}}}{k} \rightarrow \Pi(y)$ p.s., ce qui prouve que (6.1) est vraie pour $f = 1_{\{y\}}$.

Supposons maintenant que f est bornée; il existe alors une constante M telle que $g = f - M \geq 0$, puis une suite $(g_i, i \geq 1)$ de fonctions à support fini telle que g_i converge en croissant vers g quand $i \rightarrow +\infty$. Pour tout $i \geq 1$, nous avons établi que $\lim_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g_i(X_k^x) = \int_{\mathbb{E}} g_i(x) d\Pi(x)$ p.s. Nous en déduisons que pour tout $i \geq 1$,

$$\liminf_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_k^x) \geq \int_{\mathbb{E}} g_i(x) d\Pi(x) \text{ p.s.}$$

d'où $\liminf_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(X_k^x) \geq \int_{\mathbb{E}} g(x) d\Pi(x)$ p.s. Par linéarité, nous avons donc établi que

$$\liminf_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k^x) \geq \int_{\mathbb{E}} f(x) d\Pi(x) \text{ p.s.}$$

Remplaçant f par $-f$, nous en déduisons que $\limsup_n \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k^x) \leq \int_{\mathbb{E}} f(x) d\Pi(x)$ p.s., ce qui termine la démonstration. \square

Il est alors naturel dans les calculs d'intégrale par rapport à Π de remplacer la simulation d'une suite de variables aléatoires i.i.d. de loi Π (qui peut être difficile à réaliser) par celle d'une chaîne de Markov irréductible de probabilité invariante Π , puis la loi forte des grands nombres par le théorème ergodique. Cependant, il serait souhaitable d'avoir un analogue du théorème de la limite centrale, permettant de connaître la vitesse de convergence de $\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k^x)$ vers $\int_{\mathbb{E}} f(y) d\Pi(y)$. Ce n'est hélas pas possible et on peut construire des exemples dans lesquels la vitesse est aussi lente (et aussi rapide) que l'on veut.

Nous allons tout d'abord établir des propriétés du spectre d'une matrice A irréductible sur un espace fini \mathbb{E} noté $\{1, \dots, d\}$. Remarquons que si Q est une matrice de transition et si $\underline{1}$ désigne le vecteur de \mathbb{R}^d dont toutes les composantes sont égales à 1, $Q \underline{1} = \underline{1}$, ce qui entraîne que 1 est valeur propre de Q . De plus, Π est une probabilité invariante si c'est un vecteur propre de tQ pour la valeur propre 1. On notera $x \gg 0$ un vecteur $(x_i, 1 \leq i \leq d)$ dont les composantes x_i sont toutes strictement positives.

Théorème 6.2 (Théorème de Perron Frobenius)

Soit A une matrice $d \times d$ irréductible à coefficients positifs. Alors il existe une valeur propre de A notée ρ_A et appelée valeur propre de Perron Frobenius de A , telle que :

- (i) $\rho_A > 0$ est valeur propre simple de A .
- (ii) Toute autre valeur propre $\lambda \neq \rho_A$ de A est telle que $|\lambda| < \rho_A$.
- (iii) Il existe un vecteur propre $x \gg 0$ de A et un vecteur propre $y \gg 0$ de A^* pour la valeur propre ρ_A .
- (iv) Pour tout $i, j \in \{1, \dots, d\}$ et tout vecteur $x \gg 0$ de \mathbb{R}^d ,

$$\lim \frac{1}{n} \ln \left(\sum_{j=1}^d A^n(i, j) x_j \right) = \lim \frac{1}{n} \ln \left(\sum_{i=1}^d x_i A^n(i, j) \right) = \ln(\rho_A).$$

Démonstration

(1) Pour tout vecteur $x \in \mathbb{R}^d$ dont les composantes sont positives ou nulles, notons

$$\rho(x) = \inf \left\{ \frac{\sum_{j=1}^d A(i, j) x_j}{x_i} ; x_i > 0 \right\}.$$

Alors $\rho(x) < +\infty$ et pour tout $i \in \{1, \dots, d\}$ on a $x_i \rho(x) \leq \sum_j A(i, j) x_j$. Sommant ces inégalités sur i , on en déduit que $\rho(x) \leq M = \sup_j (\sum_i A(i, j))$. Puisque A est irréductible, $\sum_j A(i, j) > 0$ pour tout $i = 1, \dots, d$ et $0 < \rho(\underline{1}) = \inf_i (\sum_j A(i, j))$. Notons

$$\rho_A = \sup_{x \geq 0, x \neq 0} \rho(x) = \sup_{x \geq 0, \|x\|=1} \inf_i \frac{\sum_j A(i, j) x_j}{x_i};$$

puisque $K = \{x \geq 0, \|x\| = 1\}$ est compact et que $\rho(\cdot)$ est l'infimum de fonctions continues, la fonction $\rho(\cdot)$ est semi-continue supérieurement et atteint son maximum en un vecteur $x^* \in K$, tel que

$$\rho_A = \inf_i \frac{\sum_j A(i, j) x_j^*}{x_i^*} \geq \rho(\underline{1}) > 0.$$

(2) Montrons que x^* est un vecteur propre de A pour la valeur propre ρ_A et que $x^* \gg 0$. Notons $\Delta = Ax^* - \rho_A x^*$; par définition de ρ_A , $\Delta_i = \sum_j A(i, j) x_j^* - \rho_A x_i^* \geq 0$. Puisque A est irréductible, l'algorithme de classification des états montre qu'il existe $k \leq d - 1$ tel que $(I + A)^k \gg 0$. S'il existe un indice i tel que $\Delta_i > 0$, alors pour tout indice j , $((I + A)^k \Delta)_j > 0$. Notons $y = (I + A)^k x^*$; pour tout j , on en déduit que $Ay - \rho_A y \gg 0$, tandis que par définition de ρ_A , il existe un indice i tel que $\sum_j A(i, j) y_j \leq \rho_A y_i$. Ceci fournit une contradiction, et on a donc $\Delta = 0$, c'est à dire que x^* est un vecteur propre de valeur propre ρ_A . Montrons enfin que $x^* \gg 0$; pour tout entier n , $A^n x^* = \rho_A^n x^*$. Changeant éventuellement le signe de x^* , on déduit l'existence d'un indice j tel que $x_j^* > 0$. Puisque A est irréductible, pour tout indice i in existe n tel que $A^n(i, j) > 0$, ce qui entraîne que $\rho_A^n x_i^* > 0$ et que $x^* \gg 0$.

(3) Soit $\lambda \neq \rho_A$ une valeur propre de A , y un vecteur propre associé à λ et $|y|$ le vecteur dont les composantes sont les valeurs absolues de celles de A . Alors pour tout indice i , $|\lambda| |y_i| \leq \sum_j A(i, j) |y_j|$, ce qui entraîne que $|\lambda| \leq \frac{\sum_j A(i, j) |y_j|}{|y_i|}$. Puisque $|y| \geq 0$ et $|y| \neq 0$, on en déduit que $|\lambda| \leq \rho(|y|) \leq \rho_A$.

(4) Soit y un autre vecteur propre de A pour la valeur propre ρ_A ; alors pour tout i , $\rho_A |y_i| \leq \sum_j A(i, j) |y_j|$, d'où

$$\rho_A \leq \frac{\sum_j A(i, j) |y_j|}{|y_i|} \leq \rho_A.$$

On en déduit que le vecteur $|y|$ est également un vecteur propre associé à la valeur propre ρ_A . L'argument précédent montre que $|y| \gg 0$. Si les vecteurs x^* et y ne sont pas colinéaires, il existe un indice $i \in \{1, \dots, d\}$ et une constante c telle que $(y - cx^*)_i = 0$ et $y - cx^* \neq 0$. Cependant, $y - cx^*$ est également un vecteur propre de A pour la valeur propre ρ_A , et le raisonnement précédent montre que $y - cx^* \gg 0$ ou $y - cx^* \ll 0$, ce qui fournit une contradiction; la valeur propre ρ_A est donc simple.

(5) Pour la matrice transposée A^* notons $r(x) = \inf_j \frac{\sum_i x_i A(i, j)}{x_j}$ et $r_A = \sup\{r(x) : x \geq 0, x \neq 0\}$. Un raisonnement similaire montre que r_A est la valeur propre de A^* ayant le plus grand module, c'est à dire que $r_A = \rho_A$, puis qu'il existe un vecteur propre de A^* dont les composantes sont toutes strictement positives.

(6) Soit $x = (x_1, \dots, x_d) \gg 0$, $\alpha = \inf\{x_i : 1 \leq i \leq d\}$ et $\beta = \sup\{x_i : 1 \leq i \leq d\}$. Soit $x^* \gg 0$ tel que $Ax^* = \rho_A x^*$, $\gamma = \inf\{x_i^* : 1 \leq i \leq d\}$ et $\delta = \sup\{x_i^* : 1 \leq i \leq d\}$. Alors pour tout $i, j = 1, \dots, d$ et $n \geq 1$,

$$\frac{\alpha}{\delta} A^n(i, j) x_j^* \leq \alpha A^n(i, j) \leq A^n(i, j) x_j \leq \frac{\beta}{\gamma} A^n(i, j) x_j^*.$$

En sommant sur $j = 1, \dots, d$ on en déduit que :

$$\frac{1}{n} \ln \left(\frac{\alpha}{\gamma} x_i^* \right) + \frac{1}{n} \ln (\rho_A^n) \leq \frac{1}{n} \ln \left(\sum_j A^n(i, j) x_j \right) \leq \frac{1}{n} \ln \left(\frac{\beta}{\gamma} x_i^* \right) + \frac{1}{n} \ln (\rho_A^n),$$

donc $\ln(\rho_A) = \lim_n \frac{1}{n} \ln \left(\sum_j A^n(i, j) x_j \right)$. Un raisonnement similaire montre que $\ln(\rho_A) = \lim_n \frac{1}{n} \ln (\sum_i x_i A^n(i, j))$, ce qui termine la démonstration. \square

En renforçant les hypothèses sur la matrice Q , on peut notablement améliorer la vitesse de convergence dans le cas d'une espace d'états fini.

Définition 6.3 (i) La période de l'état $x \in \mathbb{E}$ est le PGCD de l'ensemble des entiers $n \geq 1$ tels que $Q^n(x, x) > 0$.

(ii) On dit qu'une matrice A à coefficients positifs est apériodique si pour tout $x \in \mathbb{E}$, le PGCD de l'ensemble des entiers $n \geq 1$ tels que $A^n(x, x) > 0$ vaut 1. Lorsque A est la matrice de transition de la chaîne de Markov $(X_n, n \geq 0)$, on dit alors que la chaîne est apériodique (ce qui décrit que tous ses états sont de période 1).

Si deux états communiquent, ils ont la même période ; dans le cas d'une chaîne irréductible, si on établit que la période d'un des états est 1, la chaîne est donc apériodique. Le résultat suivant montre une propriété de communication entre les états d'une chaîne de Markov irréductible apériodique sur un ensemble fini \mathbb{E} .

Lemme 6.4 Soit Q une matrice irréductible apériodique sur un ensemble fini \mathbb{E} . Il existe un entier naturel n_0 tel que pour tout couple d'états x, y de \mathbb{E} , $Q^n(x, y) > 0$ pour tout entier $n \geq n_0$.

Démonstration Soit $y \in \mathbb{E}$, n_1, \dots, n_I des entiers premiers entre eux dans leur ensemble tels que $Q_i^{n_i}(y, y) > 0$ pour tout $i = 1, \dots, I$. D'après le théorème de Bezout, il existe des entiers relatifs k_i , $1 \leq i \leq I$ tels que $1 = \sum_{i=1}^I n_i k_i$. En regroupant les entiers $k_i > 0$ (et les entiers $k_i < 0$), on en déduit deux entiers naturels m_y et n_y tels que $Q^{m_y}(y, y) > 0$, $Q^{n_y}(y, y) > 0$ et $1 = m_y - n_y$. Notons $n_0(y) = n_y(n_y - 1)$. Pour tout entier $n \geq n_0(y)$, la division euclidienne de n par n_y , $n = q n_y + r$ est telle que $0 \leq r \leq n_y - 1 \leq q$. On en déduit que $n = (q - r) n_y + r m_y$ est tel que $Q^n(y, y) > 0$.

Pour tout couple d'états x, y , il existe un entier $m(x, y) > 0$ tel que $Q^{m(x, y)}(x, y) > 0$ et pour tout entier $n \geq n(x, y) = m(x, y) + n_0(y)$, on en déduit que $Q^n(x, y) > 0$.

Puisque \mathbb{E} est fini, il suffit alors de poser $n_0 = \max\{n(x, y) : x, y \in \mathbb{E}\}$. \square

Afin de montrer la convergence de la suite Q^n (à une vitesse exponentielle lorsque l'ensemble des états est fini), nous introduisons la notion suivante sur la matrice Q (qui est trivialement satisfaite dans le cas irréductible apériodique sur un ensemble d'états finis d'après le Lemme 6.4).

Définition 6.5 La matrice de transition Q satisfait la condition de Doeblin s'il existe un entier $l \geq 1$, une constante $\alpha \in]0, 1[$ et une probabilité λ sur \mathbb{E} tels que pour tout $x, y \in \mathbb{E}$,

$$Q^l(x, y) \geq \alpha \lambda(y). \quad (6.2)$$

L'exemple trivial $Q_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ montre que l'hypothèse d'irréductibilité ne suffit pas pour que la suite Q_0^n converge. La matrice Q_0 ne satisfait pas la condition de Doeblin et, si elle est irréductible, ses états sont de période 2. Le théorème suivant montre que sous la condition de Doeblin, quelle que soit la loi μ de X_0 , la suite μQ^n des lois de X_n converge vers une unique probabilité invariante.

Théorème 6.6 Soit Q une matrice de transition qui satisfait la condition de Doeblin sur un espace d'états \mathbb{E} dénombrable. Alors pour toute probabilité initiale μ sur \mathbb{E} , la suite de probabilités μQ^n des lois de X_n converge en variation totale vers une probabilité Π qui est l'unique probabilité invariante de la chaîne de Markov $(X_n, n \geq 0)$.

Démonstration : Nous supposons que \mathbb{E} est fini pour dégager les idées de la preuve. Supposons tout d'abord que $l = 1$. Soit ν et ν' des probabilités sur \mathbb{E} ; alors puisque $Q(x, y) - \alpha\lambda(y) \geq 0$:

$$\begin{aligned}
\|\nu Q - \nu' Q\| &\leq \sum_{y \in \mathbb{E}} |(\nu Q)(y) - (\nu' Q)(y)| \\
&= \sum_{y \in \mathbb{E}} \left| \sum_{x \in \mathbb{E}} (\nu(x) - \nu'(x)) Q(x, y) \right| \\
&= \sum_{y \in \mathbb{E}} \left| \sum_{x \in \mathbb{E}} [\nu(x) - \nu'(x)] [Q(x, y) - \alpha\lambda(y)] \right| \\
&\leq \sum_{x \in \mathbb{E}} |\nu(x) - \nu'(x)| \sum_{y \in \mathbb{E}} [Q(x, y) - \alpha\lambda(y)] \\
&\leq \sum_{x \in \mathbb{E}} |\nu(x) - \nu'(x)| (1 - \alpha) = (1 - \alpha) \|\nu - \nu'\|.
\end{aligned}$$

L'ensemble des probabilités sur \mathbb{E} peut être identifié au sous-ensemble fermé borné \mathcal{M}_1 des vecteurs $p \in \mathbb{R}^{|\mathbb{E}|}$ tels que $p(x) \geq 0$ pour tout $x \in \mathbb{E}$ et $\sum_{x \in \mathbb{E}} p(x) = 1$. Ce sous-ensemble est également compact pour la norme l_1 , c'est à dire celle de la convergence en variation totale. Le calcul précédent montre que l'application $F : \mathcal{M}_1 \rightarrow \mathcal{M}_1$ définie par $F(\nu) = \nu Q$ est contractante de rapport $1 - \alpha < 1$. Le théorème du point fixe permet de conclure qu'elle admet un unique point fixe Π et que pour toute loi initiale μ sur \mathbb{E} , la suite $F^n(\mu) = \mu Q^n$, qui est la loi de X_n , converge vers Π en variation totale.

Si $l > 1$, la suite $(X_{nl}, n \geq 1)$ est une chaîne de Markov de matrice de transition Q^l et le résultat précédent entraîne que $(\mu Q^{nl}, n \geq 1)$ converge vers l'unique probabilité Π telle que $\Pi Q^l = \Pi$. Pour tout $n \geq 1$, la division euclidienne de n par l fournit des entiers $d \geq 0$ et $0 \leq r < l$ tels que $n = dl + r$ pour lesquels :

$$\|\mu Q^n - \Pi\| = \|\mu Q^{dl+r} - \Pi Q^{dl}\| \leq (1 - \alpha)^d \|\mu Q^r - \Pi\| \leq 2(1 - \alpha)^d.$$

On en déduit que lorsque $n \rightarrow +\infty$, la suite μQ^n des lois de X_n converge vers Π en variation totale. Puisque Π est invariante pour Q^l , $\Pi Q = \Pi Q^{l+1}$ et ΠQ est donc une probabilité invariante de Q^l , ce qui entraîne que $\Pi Q = \Pi$. Soit enfin Π' une autre probabilité invariante pour Q ; alors Π' est invariante pour Q^l et on a donc $\Pi' = \Pi$. \square

Le théorème suivant améliore le théorème ergodique pour des matrices irréductibles aperiodiques sur un ensemble d'états fini; dans ce cas la suite $Q^n(x, \cdot)$ converge (sans utiliser les moyennes de Césaro) vers une unique probabilité invariante Π à une vitesse exponentielle.

Théorème 6.7 *Soit Q une matrice irréductible aperiodique sur un ensemble fini d'états \mathbb{E} . Alors :*

(i) *Il existe un vecteur $(\Pi(y), y \in \mathbb{E})$ et des constantes $\alpha \in]0, 1[$ et $M > 0$ telles que pour tout $x, y \in \mathbb{E}$, toute probabilité initiale μ sur \mathbb{E} et tout entier $n \geq 1$:*

$$\begin{aligned}
|Q^n(x, y) - \Pi(y)| &\leq M \alpha^n, \\
|P_\mu(X_n = y) - \Pi(y)| &\leq M \alpha^n.
\end{aligned}$$

De plus, Π est l'unique probabilité invariante et charge tous les éléments de \mathbb{E} qui sont récurrents.

(ii) Pour tout x et toute fonction $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k^x) - \sum_{y \in \mathbb{E}} \Pi(y) f(y) \right)$$

converge en loi vers une variable aléatoire gaussienne $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ avec $\sigma^2 < +\infty$

Démonstration

(i) Il suffit d'appliquer le lemme 6.4 et le théorème 6.6.

(ii) Nous renvoyons le lecteur à [4] pour la démonstration. \square

La valeur de σ^2 est beaucoup plus délicate à calculer que dans le théorème de la limite centrale.

6.2 Simulation exacte d'une probabilité stationnaire

La méthode suivante, due à J. Propp et D. Wilson permet une simulation exacte de la probabilité invariante Π d'une matrice récurrente irréductible Q avec un test d'arrêt explicite. Soit \mathbb{E} un espace d'états finis, Q une matrice de transition sur \mathbb{E} , U, \mathcal{U} un espace mesurable, $(U_n, n \geq 0)$ une suite i.i.d. de variables aléatoires à valeurs dans U et $\Phi : \mathbb{E} \times U \rightarrow \mathbb{E}$ une application telle que

$$P(\Phi(x, U_n) = y) = Q(x, y), \quad \forall x \in \mathbb{E}. \quad (6.3)$$

Pour tout entier $n \geq 0$, notons $\Phi_n : \Omega \rightarrow \mathbb{E}^{\mathbb{E}}$ l'application aléatoire de \mathbb{E} dans \mathbb{E} définie par $\Phi_n(x) = \Phi(x, U_n)$ pour tout $x \in \mathbb{E}$.

Soit $F : \Omega \rightarrow \mathbb{E}$ une variable aléatoire indépendante de la suite $(U_n, n \geq 0)$. On définit par récurrence la suite $(F_n : \Omega \rightarrow \mathbb{E}^{\mathbb{E}}, n \geq 0)$ par :

$$F_0 = F, \quad F_{n+1}(\cdot) = F_n(\Phi(\cdot, U_n)),$$

c'est à dire : $F_n = F \circ \Phi_0 \circ \dots \circ \Phi_{n-1}$ pour tout entier $n \geq 1$. On vérifie aisément que $(F_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov sur $\mathcal{E} = \mathbb{E}^{\mathbb{E}}$ et on note P_F la probabilité correspondante sur l'espace canonique $\mathcal{E}^{\mathbb{N}}$. Par construction, on voit que la suite des images de F_n est décroissante. On aimerait que la suite converge vers une application constante, mais l'exemple suivant montre que ce n'est pas le cas même lorsque la matrice Q est irréductible apériodique. Soit $\mathbb{E} = \{a, b\}$, $Q(x, y) = \frac{1}{2}$ pour tout $x, y \in \mathbb{E}$, $U = \{0, 1\}$ et $(U_n, n \geq 0)$ une suite de variable de Bernoulli de paramètre $\frac{1}{2}$. Soit $\Phi : \mathbb{E} \times U \rightarrow \mathbb{E}$ l'application définie par

$$\Phi(a, 0) = \Phi(b, 1) = a \quad \Phi(a, 1) = \Phi(b, 0) = b.$$

Soit $F = Id$; alors pour tout entier $n \geq 1$, $F_n(\omega)$ est soit l'identité, soit la permutation des états a et b et l'image de F_n reste égale à \mathbb{E} .

Dans la suite on impose donc la condition suivante qui fait que le cardinal de l'image de F_n diminue avec une probabilité strictement positive :

$$\forall A \subset \mathbb{E}, |A| > 1 \Rightarrow P(|\Phi(A, U_n)| < |A|) > 0. \quad (6.4)$$

Le théorème suivant justifie la simulation exacte de la loi Π .

Théorème 6.8 Soit Q une matrice de transition irréductible apériodique sur l'espace d'états \mathbb{E} fini, de probabilité invariante Π , $(U_n, n \geq 0)$ et Φ définis par (6.3) et satisfaisant (6.4). Alors les applications constantes $f^{(x)} : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ définies par $f^{(x)}(y) = x$ pour tout $y \in \mathbb{E}$ sont les seuls états récurrents de la chaîne de Markov (F_n) et sont absorbants. Soit

$$T = \inf\{n \geq 0 : |Im(F_n)| = 1\}. \quad (6.5)$$

Alors $P(T < +\infty) = 1$ et si $F = Id$,

$$P_{Id}(F_T = f^{(x)}) = \Pi(x), \quad \forall x \in \mathbb{E}. \quad (6.6)$$

Démonstration L'hypothèse (6.4) entraîne que toute application $\varphi : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ non constante est un état transitoire de la chaîne $(F_n, n \geq 0)$. D'après le lemme 6.4, il existe un entier m tel que $Q^m(x, y) > 0$ pour tout $x, y \in \mathbb{E}$. On en déduit qu'il existe un nombre $\alpha \in]0, 1[$ tel que pour toute condition initiale F , $P_F(T > m) \leq \alpha$. La propriété de Markov entraîne que pour tout entier $k \geq 1$, $P_F(T \geq km) \leq \alpha^k$. On en déduit que

$$E_F(T) = \sum_i P(T \geq i) \leq \sum_{k=0}^{\infty} m P(T \geq km) \leq \frac{m}{1 - \alpha}.$$

La chaîne (F_n) atteint donc un des états absorbants $f^{(x)}$ en un temps p.s. fini et il reste à prouver (6.6). Pour toute application $\varphi \in \mathbb{E}^{\mathbb{E}}$, et tout $y \in \mathbb{E}$, notons

$$\tilde{P}_\varphi(y) = P_\varphi(F_T = f^{(y)}).$$

Si $F_0 = Id$ et $F_T(\omega) = f^{(y)}$, on en déduit que pour tout $n \geq T(\omega)$, $Im(\Phi_0 \circ \dots \circ \Phi_n) \subset \varphi^{-1}(y)$, d'où $Im(Id \circ \Phi_0 \circ \dots \circ \Phi_n) \subset \varphi^{-1}(y)$. La chaîne (F_n) partant de Id est donc absorbée en une application $f^{(x)}$ pour $x \in \varphi^{-1}(y)$. Réciproquement, si la chaîne (F_n) partant de Id est absorbée en $f^{(x)}$ pour $x \in \varphi^{-1}(y)$, en composant avec φ , on en déduit que la chaîne partant de φ est absorbée en $f^{(y)}$, d'où

$$\tilde{P}_\varphi(y) = \sum_{x \in \varphi^{-1}(y)} \tilde{P}_{Id}(x).$$

D'autre part en décomposant suivant les valeurs de Φ_0 , on obtient pour tout $y \in \mathbb{E}$:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{Id}(y) &= \sum_{\varphi} P(\Phi_0 = \varphi, F_T = f^{(y)}) \\ &= \sum_{\varphi} P(\Phi_0 = \varphi) \sum_{x \in \varphi^{-1}(y)} \tilde{P}_{Id}(x) \\ &= \sum_{x \in \mathbb{E}} \tilde{P}_{Id}(x) \sum_{\{\varphi \in \mathbb{E}^{\mathbb{E}} : \varphi(x) = y\}} P(\Phi_0 = \varphi) \\ &= \sum_{x \in \mathbb{E}} \tilde{P}_{Id}(x) P(\Phi_0(x) = y) = \sum_{x \in \mathbb{E}} \tilde{P}_{Id}(x) Q(x, y). \end{aligned}$$

On en déduit que \tilde{P}_{Id} est une probabilité invariante de Q et est donc égale à Π . \square

L'utilisation pratique de ce théorème demande de choisir Φ pour ne calculer que les images par $\Phi_0 \circ \dots \circ \Phi_N$ de quelques points de \mathbb{E} (dont le nombre d'éléments est grand) et de stopper la composition lorsque les images de ces points sont les mêmes.

6.3 Probabilités réversibles.

La notion suivante renforce celle de probabilité invariante. Si une matrice de transition irréductible apériodique admet une probabilité réversible, on en déduit des renseignements précis sur son spectre (qui renforcent sensiblement le théorème de Perron Frobenius).

Définition 6.9 Soit Q une matrice de transition sur l'espace d'états \mathbb{E} . Une probabilité Π sur \mathbb{E} est réversible pour Q (ou pour une chaîne de Markov de matrice de transition Q) si

$$\Pi(x) Q(x, y) = \Pi(y) Q(y, x), \quad \forall x, y \in \mathbb{E}. \quad (6.7)$$

En sommant l'équation (6.7) sur $y \in \mathbb{E}$, on déduit que si Π est réversible pour Q ,

$$\Pi(x) = \sum_y \Pi(x) Q(x, y) = \sum_y \Pi(y) Q(y, x),$$

ce qui entraîne que Π est invariante. Si la chaîne de Markov $(X_n, n \geq 0)$ est de matrice de transition Q et si la loi de X_n est la probabilité réversible Π ,

$$P(X_n = x, X_{n+1} = y) = P(X_n = y, X_{n+1} = x);$$

de plus, si $\Pi(x) = 0$ et $\Pi(y) > 0$, alors $Q(y, x) = 0$, c'est à dire que la restriction de Q au support de Π est encore une matrice de transition pour laquelle Π est réversible; on peut donc se ramener au cas où $\Pi(x) > 0$ pour tout $x \in \mathbb{E}$. Si \mathbb{E} est un ensemble à N éléments noté $\mathbb{E} = \{1, \dots, N\}$ et Π est une mesure strictement positive sur \mathbb{E} , notons D la matrice (N, N) diagonale définie par

$$D(i, i) = \sqrt{\Pi(i)}, \quad \forall i \in \mathbb{E}.$$

De plus, l'opérateur de $L^2(\Pi)$ adjoint de celui associé à une matrice A est associé à la matrice $\tilde{A} = D^{-2} A^* D^2$, où A^* désigne la transposée de A . Un calcul immédiat montre que la matrice de transition Q sur \mathbb{E} admet Π comme probabilité réversible si et seulement si $D Q D^{-1}$ est symétrique; ceci traduit le fait que l'opérateur associé à Q dans $L^2(\Pi)$ est autoadjoint. Le résultat suivant montre que si Π est une probabilité invariante pour la matrice de transition Q , on peut définir une nouvelle matrice de transition P telle que Π soit réversible pour P .

Proposition 6.10 Soit Π une probabilité strictement positive sur \mathbb{E} fini et Q une matrice de transition telle que Π est invariante. Soit

$$\tilde{Q} = D^{-2} Q^* D^2 \quad \text{et} \quad P = \frac{1}{2}(Q + \tilde{Q});$$

alors \tilde{Q} est une matrice de transition admettant Π comme probabilité invariante et P est une matrice de transition admettant Π comme probabilité réversible.

Démonstration : Le fait que Π soit invariante entraîne que \tilde{Q} est une matrice de transition et P l'est donc aussi. Puisque Q est une matrice de transition, Π est invariante pour \tilde{Q} . Un calcul immédiat montre enfin que Π est réversible pour P . \square

Le résultat suivant donne des conditions suffisantes sur Q pour que la probabilité uniforme sur \mathbb{E} soit invariante ou réversible; la démonstration élémentaire est laissée au lecteur.

Proposition 6.11 Soit \mathbb{E} un ensemble d'états fini.

(i) Soit Q une matrice bistochastique, c'est à dire une matrice de transition telle que

$$\sum_{x \in \mathbb{E}} Q(x, y) = 1, \quad \forall y \in \mathbb{E}.$$

Alors la probabilité uniforme sur \mathbb{E} est invariante pour Q .

(ii) Soit Q une matrice de transition symétrique. Alors la probabilité uniforme sur \mathbb{E} est réversible pour Q .

Dans le cas où la mesure invariante Π est réversible pour Q , l'écriture de la différence entre Q^n et Π est légèrement plus précise, comme le montre la :

Proposition 6.12 Soit $\mathbb{E} = \{1 \dots, d\}$, Q une matrice de transition irréductible aperiodique sur \mathbb{E} admettant une probabilité invariante Π réversible. Alors Q est diagonalisable, ses valeurs propres $\lambda_1 = 1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_d > -1$ sont réelles, 1 est simple et il existe une base orthonormée $(\phi_i, 1 \leq i \leq d)$ de \mathbb{R}^d telle que pour tout entier $n \geq 1$,

$$Q^n(x, y) = \Pi(y) + \frac{\sqrt{\Pi(y)}}{\sqrt{\Pi(x)}} \sum_{l=2}^d \lambda_l^n \phi_l(x) \phi_l(y). \quad (6.8)$$

Notons $\alpha = \sup\{|\lambda_i|, 2 \leq i \leq d\} \in]0, 1[$; pour tout entier $n \geq 1$ et tout $x \in \mathbb{E}$:

$$\left(\sum_{y \in \mathbb{E}} |Q^n(x, y) - \Pi(y)| \right)^2 \leq \frac{(Q^n(x, y) - \Pi(y))^2}{\Pi(y)} \leq \frac{\alpha^{2n}}{\Pi(x)}. \quad (6.9)$$

Démonstration : Puisque Π est Q réversible, si on note D la matrice diagonale définie par $D(i, i) = \sqrt{\Pi(i)}$, DQD^{-1} est symétrique, donc diagonalisable dans \mathbb{R} par une matrice de passage orthogonale. Soit donc $(\phi_i, 1 \leq i \leq d)$ une base orthonormée de vecteurs propres de DQD^{-1} pour les valeurs propres λ_i ordonnées par ordre décroissant. Clairement les vecteurs ψ_i définis par $\psi_i(x) = \frac{\psi_i(x)}{\sqrt{\Pi(x)}}$ sont des vecteurs propres de Q pour les mêmes valeurs propres.

Le théorème de Perron Frobenius entraîne donc que 1 est valeur propre simple et que les autres valeurs propres de Q appartiennent à l'intervalle $[-1, 1[$ et il reste à montrer que -1 n'est pas valeur propre. Supposons qu'il existe un vecteur non nul et différent de $c \underline{1}$ tel que $Qv = -v$; alors $Q^2v = v$ et v est vecteur propre de la matrice Q^2 pour la valeur propre 1. Il suffit donc de prouver que la matrice de transition Q^2 est irréductible pour en déduire une contradiction par application du théorème de Perron-Frobenius. D'après le lemme 6.4, il existe un entier n_0 tel que pour tout couple d'états x, y on a $Q^{2n_0}(x, y) > 0$, ce qui prouve l'irréductibilité de Q^2 .

De plus, on peut choisir comme vecteur $\psi_1 = \underline{1}$, soit comme vecteur ϕ_1 le vecteur unitaire $(\sqrt{\Pi(x)}, 1 \leq x \leq d)$. Pour tout couple de vecteurs u, v de \mathbb{R}^d et pour tout entier $n \geq 1$, la forme bilinéaire définie par la matrice DQ^nD^{-1} satisfait

$$\langle u, DQ^nD^{-1}v \rangle = \sum_{l=1}^d \lambda_l^n \langle u, \phi_j \rangle \langle v, \phi_j \rangle.$$

L'équation (6.8) s'en déduit immédiatement pour $u(\cdot) = \frac{1}{\sqrt{\Pi(x)}} 1_{\{x\}}(\cdot)$ et $v(\cdot) = \sqrt{\Pi(y)} 1_{\{y\}}(\cdot)$.

L'équation (6.8) entraîne que pour tout $x, y \in \mathbb{E}$,

$$a(x, y) = \sqrt{\Pi(y)} \left(\frac{Q^n(x, y)}{\Pi(y)} - 1 \right) = \frac{1}{\sqrt{\Pi(x)}} \sum_{l=2}^d \lambda_l^n \phi_l(x) \phi_l(y).$$

La base $(\phi_l, 1 \leq l \leq d)$ étant orthonormée, on en déduit que

$$\sum_{y=1}^d a(x, y)^2 = \frac{1}{\Pi(x)} \sum_{l=2}^d \lambda_l^{2n} \phi_l(x)^2 \leq \frac{\alpha^{2n}}{\Pi(x)},$$

ce qui montre la seconde inégalité de (6.9). La première inégalité de (6.9) découle immédiatement de l'inégalité de Schwarz, ce qui termine la démonstration. \square

On peut également donner une majoration de l'erreur commise en remplaçant l'espérance d'une fonction par rapport à la probabilité réversible Π par l'espérance de cette fonction de X_n .

Proposition 6.13 *Sous les hypothèses de la Proposition 6.12, soit $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$; notons*

$$E_{\Pi}(f) = \sum_{y \in \mathbb{E}} f(y) \Pi(y) \quad \text{et} \quad \text{Var}_{\Pi}(f) = \sum_{y \in \mathbb{E}} [f(y) - E_{\Pi}(f)]^2 \Pi(y).$$

Alors si $(X_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov de matrice de transition Q , pour tout entier $n \geq 1$ et tout $x \in \mathbb{E}$,

$$\left[E(f(X_n) | X_0 = x) - E_{\Pi}(f) \right]^2 \leq \frac{\alpha^{2n}}{\Pi(x)} \text{Var}_{\Pi}(f). \quad (6.10)$$

La démonstration est laissée en exercice.

Pratiquement, les valeurs de α et $\text{Var}_{\Pi}(f)$ sont impossibles à calculer et pour appliquer le théorème ergodique, il faut que l'on soit proche de la probabilité invariante bien avant l'instant terminal pour lequel on simule la chaîne. On fait démarrer la simulation en un état x_0 quelconque, puis on la simule jusqu'à l'instant n_0 à partir duquel on considère que la loi de X_n est proche de la probabilité invariante : c'est la phase de « préchauffage ». On évalue ensuite $f(X_{n_0+k n_1})$ en des instants séparés par un temps n_1 (inférieur à n_0) tel que l'on puisse considérer que les variables aléatoires $X_{n_0+k n_1}$, $k \geq 1$ sont « presque indépendantes » (c'est une propriété de mélange des chaînes irréductibles apériodiques) et on calcule

$$\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K f(X_{n_0+k n_1}).$$

6.4 Algorithme de Hastings-Metropolis.

Afin de calculer $\int_{\mathbb{E}} f d\Pi$, au lieu de simuler une suite de variables aléatoires indépendantes X_i de loi « exactement » Π (qui peut être très difficile à simuler par les méthodes du chapitre 2), il suffit donc de simuler une chaîne de Markov récurrente irréductible apériodique de matrice de transition P (à déterminer) telle que cette chaîne ait Π comme probabilité invariante (ou réversible); c'est le but de l'algorithme de Hastings-Metropolis. On remplace alors la loi des grands nombres par le théorème ergodique. Il faut concrètement que la simulation de la chaîne soit « simple » et rapide en temps de calcul et que l'erreur commise soit connue et faible; le théorème 6.7 ou les propositions 6.12 et 6.13 assurent que la convergence vers Π est « exponentiellement rapide » et remplacent le théorème de la limite centrale.

Soit \mathbb{E} un ensemble d'états fini ou dénombrable, Q une matrice de transition sur \mathbb{E} et Π une probabilité sur \mathbb{E} . Fixons $x_0 \in \mathbb{E}$ tel que $\Pi(x_0) > 0$ et posons $X_0 = x_0$. On construit alors $(X_n, n \geq 0)$ de façon itérative par une méthode similaire à la méthode du rejet :

Supposons que pour $n \geq 0$, $X_n = x_n$ ait été défini et construisons X_{n+1} . On simule des variables aléatoires Y_n et U_n indépendantes de X_k $k \leq n$ et indépendantes telles que :

- Y_n est de loi $Q(x_n, \cdot)$, c'est à dire que pour tout $y \in \mathbb{E}$, $P(Y_n = y) = Q(x_n, y)$.
- U_n suit une loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$ sur l'intervalle $[0, 1]$.

Posons

$$\alpha(x, y) = \min \left(1, \frac{\Pi(y) Q(y, x)}{\Pi(x) Q(x, y)} \right),$$

avec la convention $\alpha(x, y) = 1$ si $\Pi(x) Q(x, y) = 0$, puis :

- Si $U_n \leq \alpha(X_n, Y_n)$, $X_{n+1} = Y_n$, c'est à dire que l'on « accepte » la transition.
- Si $U_n > \alpha(X_n, Y_n)$, $X_{n+1} = X_n$, c'est à dire que l'on « rejette » la transition.

On a alors la :

Proposition 6.14 *Le processus $(X_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P définie par*

$$\begin{cases} P(x, y) = Q(x, y) \alpha(x, y) = Q(x, y) \min \left(1, \frac{\Pi(y) Q(y, x)}{\Pi(x) Q(x, y)} \right) & \text{si } x \neq y, \\ P(x, x) = 1 - \sum_{y \neq x} P(x, y). \end{cases} \quad (6.11)$$

De plus Π est une probabilité réversible (donc invariante) pour P .

Démonstration. Il est clair que la loi de X_{n+1} sachant $X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n$ ne dépend que de x_n et que (X_n) est donc une chaîne de Markov. Supposons que $P(X_n = x) > 0$; alors pour $y \neq x$, l'indépendance de U_n et de (X_n, Y_n) et la loi conditionnelle de Y_n sachant $X_n = x$ entraînent :

$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = y | X_n = x) &= P(Y_n = y, U_n \leq \alpha(x, y) | X_n = x) \\ &= \frac{P(Y_n = y, U_n \leq \alpha(x, y), X_n = x)}{P(X_n = x)} \\ &= P(U_n \leq \alpha(x, y)) P(Y_n = y | X_n = x) \\ &= \alpha(x, y) Q(x, y). \end{aligned}$$

Enfin, l'égalité

$$P(X_{n+1} = x | X_n = x) = 1 - \sum_{y \neq x} P(X_{n+1} = y | X_n = x)$$

termine la caractérisation de la matrice de passage de (X_n) . Si $x \neq y$, puisque $\Pi(x) \geq 0$:

$$\Pi(x) P(x, y) = \Pi(x) \alpha(x, y) Q(x, y) = \min\{\Pi(x) Q(x, y), \Pi(y) Q(y, x)\} = \Pi(y) P(y, x),$$

ce qui prouve que Π est réversible pour P . \square

Puisque Π est réversible pour P , la chaîne ne visite que des états $y \in \mathbb{E}$ tels que $\Pi(y) > 0$ et on peut donc remplacer \mathbb{E} par le support de Π , c'est à dire ne considérer que des matrices de transition Q et P sur $\mathbb{E}_1 = \{x \in \mathbb{E}, \Pi(x) > 0\}$. D'autre part, la définition de α suggère de ne considérer que des matrices Q sur \mathbb{E}_1 telles que pour $x \neq y$, $Q(x, y) > 0$ entraîne $Q(y, x) > 0$. Une grande latitude est possible dans le choix de Q et de x_0 ; nous y reviendrons ultérieurement.

Afin de pouvoir utiliser le théorème ergodique 6.1 pour approximer $\int_{\mathbb{E}} f d\Pi$ par les moyennes de Césaro $\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k)$, ou bien le théorème 6.7 pour avoir une vitesse de convergence dans

cette approximation, il faut que la matrice P définie dans la proposition précédente soit irréductible, ou bien irréductible et apériodique. Les deux résultats suivants donnent des conditions suffisantes sur Q pour assurer ces propriétés de P .

Proposition 6.15 *Si la probabilité Π est strictement positive et si la matrice de transition Q est telle que pour tout $x \neq y$, $Q(x, y) \neq 0$, alors la matrice de transition P définie par (6.11) est irréductible.*

Démonstration : Si $x \neq y$, $P(x, y) = Q(x, y) \alpha(x, y) > 0$ et tous les états communiquent donc. \square

Proposition 6.16 *Soit Π une probabilité non constante sur \mathbb{E} discret, Q une matrice de transition symétrique irréductible. Alors la matrice de transition P définie par (6.11) est irréductible apériodique et admet Π comme probabilité réversible (donc invariante).*

Démonstration. Puisque la probabilité Π est non nulle et que $\alpha(x, y) = \min\left(1, \frac{\Pi(y)}{\Pi(x)}\right)$, on voit que $\alpha(x, y) \neq 0$ pour tout $x, y \in \mathbb{E}$. Montrons tout d'abord l'irréductibilité de P . Puisque Q est irréductible, pour tout $x \neq y$ (en supprimant d'éventuelles boucles du chemin menant de x à y) on déduit qu'il existe des états deux à deux distincts $x_k \in \mathbb{E}$, $1 \leq k \leq K$ tels que $x_1 = x$, $x_K = y$ et pour tout $k \in \{1, \dots, K-1\}$, $Q(x_k, x_{k+1}) > 0$. La définition de $P(x_k, x_{k+1})$ pour $x_k \neq x_{k+1}$ montre que pour tout $k \in \{1, \dots, K-1\}$, $P(x_k, x_{k+1}) > 0$ donc $P^K(x, y) > 0$ et P est irréductible.

La chaîne étant irréductible, tous les états ont la même période et pour prouver qu'elle est apériodique, il suffit de prouver l'existence d'un état $x \in \mathbb{E}$ tel que $P(x, x) > 0$. Supposons que pour tout état $x \in \mathbb{E}$, $P(x, x) = 0$; alors pour tout $x \in \mathbb{E}$:

$$\begin{aligned} 0 &= 1 - \sum_{y \neq x} P(x, y) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{E}} Q(x, y) - \sum_{y \neq x} Q(x, y) \alpha(x, y) \\ &= Q(x, x) + \sum_{y \neq x} Q(x, y) [1 - \alpha(x, y)]. \end{aligned}$$

Les termes de la dernière somme étant tout positifs, on en déduit que si $y \neq x$ et $Q(x, y) > 0$, $\alpha(x, y) = 1$, c'est à dire que $\Pi(y) \geq \Pi(x)$. La symétrie de Q entraîne (en intervertissant x et y) que si $Q(x, y) > 0$, $\Pi(y) \leq \Pi(x)$, d'où $\Pi(x) = \Pi(y)$.

Puisque Q est irréductible, pour tout couple d'états $x \neq y$, il existe une suite d'états deux à deux distincts x_k , $1 \leq k \leq K$ tels que $x_1 = x$, $x_K = y$ et $Q(x_k, x_{k+1}) > 0$ pour $0 \leq k \leq K-1$. On en déduit que $\Pi(x_k) = \Pi(x)$ pour $1 \leq k \leq K$, c'est à dire que $\Pi(x) = \Pi(y)$. La probabilité Π est donc constante, ce qui fournit une contradiction. \square

Dans le cas précédent d'une matrice Q symétrique (qui est l'algorithme original de Metropolis), la procédure de test est un peu plus simple car

$$\alpha(x, y) = \min\left(1, \frac{\Pi(y)}{\Pi(x)}\right).$$

Pour maximiser les chances d'accepter les transitions, il faut que $\alpha(X_n, Y_n)$ soit égal à 1 ou proche de 1, ce qui demande que $\frac{\Pi(y_n)}{\Pi(x_n)}$ ne devienne pas trop petit.

Lorsque $Q(x, y) = q(y)$, c'est à dire si toutes les lignes de Q sont égales, on dit que l'algorithme est indépendant et dans ce cas :

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

Dans ce cas, la valeur de Y_n ne dépend pas de X_n , mais son rejet éventuel dépend de X_n .

L'algorithme général de Hastings Metropolis est donc :

```

Initialiser  $X$  avec  $x_0$ 
 $t \leftarrow 0$ 
Répéter
   $i \leftarrow X$ 
  Produire  $j$  avec la probabilité  $Q(i, j)$ 
   $\alpha = (\Pi(j) * Q(j, i)) / (\Pi(i) * Q(i, j))$ 
  Si  $\alpha \geq 1$  faire
     $X \leftarrow j$ 
  Sinon
    Si Random  $< \alpha$  faire
       $X \leftarrow j$ 
  Fin
Fin
 $t \leftarrow t + 1$ 
Jusqu'à l'arrêt de la simulation

```

Dans les cas où Q est symétrique, le calcul de α est beaucoup plus simple et on a intérêt à tester si $\Pi(j) < \Pi(i)$ avant de calculer α .

Souvent, l'ensemble des états est muni d'une structure de graphe et on choisit pour Q la matrice de transition d'une marche aléatoire symétrique sur ce graphe (c'est à dire que pour tout état $x \in \mathbb{E}$, $Q(x, \cdot)$ est la loi uniforme sur l'ensemble des états y voisins de x).

Un autre cas particulier important est celui où la probabilité Π a une forme exponentielle.

Définition 6.17 Soit \mathbb{E} un ensemble fini, $\beta > 0$ une constante et $V : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction définie sur \mathbb{E} . La mesure de Gibbs associée à β et V est définie par :

$$\Pi_\beta(x) = \frac{\exp(-\beta V(x))}{Z(\beta)}, \quad \forall x \in \mathbb{E},$$

où la constante de normalisation $Z(\beta)$ est la fonction de partition

$$Z(\beta) = \sum_{x \in \mathbb{E}} \exp(-\beta V(x)).$$

Intuitivement, β est l'inverse de la température et V (le plus souvent positive) est la fonction d'énergie des états. L'utilisation de ces probabilités vient du fait qu'elles maximisent l'entropie

$$H(\mu) = - \sum_{x \in \mathbb{E}} \mu(x) \ln(\mu(x))$$

(avec la convention $y \ln(y) = 0$ quand $y = 0$) parmi les probabilité μ sur \mathbb{E} telles que l'énergie moyenne du système $\int_{\mathbb{E}} V(x) d\mu(x)$ soit fixée égale à C . En effet, pour maximiser $H(\mu) = -\sum_{x \in \mathbb{E}} \mu(x) \ln(\mu(x))$ sous les contraintes $\sum_{x \in \mathbb{E}} \mu(x) = 1$ et $\sum_{x \in \mathbb{E}} V(x) \mu(x) = C$, on utilise la méthode des multiplicateurs de Lagrange et on considère la fonction

$$\Phi(\beta, b, \mu) = \sum_{x \in \mathbb{E}} \mu(x) \ln(\mu(x)) + \beta \left(\sum_{x \in \mathbb{E}} V(x) \mu(x) - C \right) + b \left(\sum_{x \in \mathbb{E}} \mu(x) - 1 \right).$$

Les équations $\frac{\partial \Phi}{\partial \mu(x)}(\beta, b, \mu) = 0$ pour tout $x \in \mathbb{E}$ entraînent que $\ln(\mu(x)) + 1 + \beta V(x) + b = 0$ pour tout $x \in \mathbb{E}$. On en déduit que $\mu(x) = \frac{\exp(-\beta V(x))}{Z(\beta)}$, où puisque μ est une probabilité, $Z(\beta) = \sum_{x \in \mathbb{E}} \exp(-\beta V(x))$. Enfin la constante β est déterminée par la contrainte

$$\sum_{x \in \mathbb{E}} V(x) \frac{\exp(-\beta V(x))}{Z(\beta)} = C.$$

En multipliant cette égalité par $Z(\beta) e^{\beta C}$, ceci revient à chercher les zéros de la fonction

$$G(\beta) = \sum_{x \in \mathbb{E}} (V(x) - C) e^{-\beta(V(x)-C)}.$$

Un calcul facile montre que $G' \leq 0$, $\lim_{\beta \rightarrow -\infty} G(\beta) = +\infty$ et $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} G(\beta) = -\infty$; la fonction G admet donc un seul zéro.

L'entropie mesure l'absence d'information sur le système. En effet, si l'énergie est constante (qui traduit le fait qu'on ne dispose d'aucune information), la probabilité qui maximise l'entropie, c'est à dire pour laquelle l'incertitude est maximale, est la probabilité uniforme. Au contraire, si μ est une mesure de Dirac (il n'y a aucune incertitude) et l'entropie $H(\mu)$ est nulle.

Dans le cas d'une mesure de Gibbs Π_β , si la matrice de transition Q est symétrique et irréductible, à une température fixée, il est inutile de calculer la fonction de partition $Z(\beta)$ puisque :

$$\alpha(x, y) = \exp \left[-\beta(V(y) - V(x))^+ \right].$$

Dans ce cas, l'algorithme est simplifié comme suit :

```

Initialiser  $X$  avec  $x_0$ 
 $t \leftarrow 0$ 
Répéter
   $i \leftarrow X$ 
  Produire  $j$  avec la probabilité  $Q(i, j)$ 
  Si  $V(j) < V(i)$ 
     $X \leftarrow j$ 
  Sinon
    Si Random  $< \exp[-\beta(V(j) - V(i))]$  faire
       $X \leftarrow j$ 
  Fin
Fin
 $t \leftarrow t + 1$ 
Jusqu'à l'arrêt de la simulation

```

6.5 Algorithme du recuit simulé.

Le but de cette méthode est de trouver le minimum global d'une fonction $V : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ définie sur un ensemble \mathbb{E} fini, mais trop grand pour faire une recherche systématique. Un exemple typique est le célèbre « problème du voyageur de commerce » suivant : Un voyageur de commerce doit visiter N clients dans N villes différentes et revenir à son point de départ ; il cherche à minimiser la longueur du trajet à effectuer. Le nombre de permutations sur l'ensemble des villes est $N!$ et vaut environ 10^{159} si $N = 100$. Si on ne tient compte ni du point initial ni du sens du parcours, le nombre de trajets peut être ramené à $\frac{(N-1)!}{2}$. La formule de Stirling donne un équivalent du nombre « réduit » de trajets $\sqrt{\frac{\pi}{2}} N^{N-\frac{1}{2}} e^{-N}$. Même pour 30 villes, le nombre de trajets possibles est d'environ 10^{30} et pour se convaincre de l'impossibilité d'énumérer tous ces trajets pour trouver le plus court, il suffit de voir que le nombre d'opérations élémentaires qui pourraient avoir été effectuées par un ordinateur actuel qui aurait fonctionné depuis la naissance de l'univers (voilà environ 2×10^{10} années) est d'environ 4×10^{26} . Un des problèmes techniques est que les méthodes classiques (telles que la descente de gradient) risquent de rester piégées dans des minima locaux de V . Le problème du voyageur de commerce ayant fait l'objet de très nombreux travaux, certains algorithmes spécifiques sont plus efficaces que celui du recuit simulé que nous allons présenter. Le recuit simulé a par contre l'avantage de pouvoir s'adapter à de nombreuses situations où la fonction V que l'on cherche à minimiser possède de nombreux minima locaux.

L'utilisation de mesures de Gibbs dans ce contexte est naturelle car, comme le montre le résultat suivant, à basse température, elles se concentrent sur les états d'énergie minimale.

Proposition 6.18 *Soit \mathbb{E} un ensemble fini, $V : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$, $m = \min\{V(x), x \in \mathbb{E}\}$ le minimum de V et $\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{E} : V(x) = m\}$ l'ensemble des points où V atteint son minimum. Pour tout $\beta > 0$, soit Π_β la mesure de Gibbs définie par la définition 6.17. Alors quand $\beta \rightarrow +\infty$ (c'est à dire quand la température converge vers 0), pour tout $x \in \mathbb{E}$, $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \Pi_\beta(x) = \frac{1}{|\mathcal{E}|} 1_{\mathcal{E}}(x)$ et pour tout $\varepsilon > 0$, $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \Pi_\beta(\{x \in \mathbb{E} : V(x) \geq m + \varepsilon\}) = 0$.*

Démonstration : Puisque \mathcal{E} est fini, il existe $\delta > 0$ tel que $\inf_{y \notin \mathcal{E}} V(y) \geq m + \delta$. Pour tout $\beta > 0$ et $x \in \mathbb{E}$,

$$\Pi_\beta(x) = \frac{\exp(-\beta V(x))}{|\mathcal{E}| \exp(-\beta m) + \sum_{y \notin \mathcal{E}} \exp(-\beta V(y))} = \frac{\exp(-\beta [V(x) - m])}{|\mathcal{E}| + \sum_{y \notin \mathcal{E}} \exp(-\beta [V(y) - m])}.$$

On en déduit que lorsque $\beta \rightarrow +\infty$, $\exp(-\beta [V(y) - m]) \rightarrow 0$ si $y \notin \mathcal{E}$ ce qui entraîne $\Pi_\beta(x) \rightarrow \frac{1}{|\mathcal{E}|}$ si $x \in \mathcal{E}$ et $\Pi_\beta(x) \rightarrow 0$ sinon. Enfin, puisque $Z(\beta) \geq e^{-\beta m} |\mathcal{E}|$, pour tout $\varepsilon > 0$,

$$\Pi_\beta(V \geq m + \varepsilon) \leq \sum_{x \in \mathbb{E}} \frac{e^{-\beta(m+\varepsilon)}}{e^{-\beta m} |\mathcal{E}|} = e^{-\beta \varepsilon} \frac{|\mathbb{E}|}{|\mathcal{E}|}. \quad \square$$

On dit que la suite $(X_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov in-homogène si sa matrice de transition à chaque instant dépend de l'instant, c'est à dire s'il existe une suite $(P_n, n \geq 1)$ de matrices de transition sur \mathbb{E} telle que pour tout $n \geq 0$ et tout choix d'éléments $x_k \in \mathbb{E}$, $0 \leq k \leq n + 1$:

$$P(X_{n+1} = x_{n+1} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = P_n(x_n, x_{n+1}).$$

On en déduit que $P(X_{n+1} = y | X_0 = x) = (P_1 \cdots P_n)(x, y)$ et que si ν_0 désigne la loi de X_0 , la loi ν_n de X_n est $\nu_n = \nu_0 P_1 \cdots P_n$. On construit la chaîne in-homogène suivante :

On fixe une matrice de transition Q symétrique (c'est à dire telle que $Q(x, y) = Q(y, x)$ pour tout couple d'états x, y de \mathbb{E}) et satisfaisant la condition de Doeblin (6.2). On se donne une suite de paramètres $(\beta_n, n \geq 1)$ qui croit vers $+\infty$ et on construit la matrice de transition P_n associée à Q et à la température $1/\beta_n$ par l'algorithme de Hastings Metropolis, c'est à dire en posant :

$$\begin{aligned} P_n(x, y) &= Q(x, y) e^{-\beta_n (V(y) - V(x))^+} \quad \text{si } x \neq y, \\ P_n(x, x) &= 1 - \sum_{y \neq x} P_n(x, y). \end{aligned} \quad (6.12)$$

Il faut alors trouver une suite $(\beta_n, n \geq 1)$, appelée schéma de température, telle que la chaîne ne reste pas piégée dans un minimum local de V , que l'on appelle un puits de potentiel. La terminologie est inspirée de la métallurgie où le métal est refroidi lentement. Le problème crucial est la vitesse de refroidissement, c'est à dire la vitesse de convergence de la température $1/\beta_n$ vers 0. En effet, si le refroidissement est trop rapide, le système est « gelé » dans un état qui ne correspond pas à un minimum du potentiel V , tandis que si le refroidissement est trop lent, le temps de calcul devient trop long. Les résultats sur la vitesse de convergence sont importants car ils donnent la précision de l'algorithme ; ils ne seront pas abordés et on renvoie à [3] ou [7] pour plus de détails.

Dans le cas du problème du voyageur de commerce, on fixe la ville de départ et on tient compte de l'ordre dans lequel les villes sont parcourues. On identifie un trajet à une permutation et l'espace des états est donc l'ensemble \mathcal{S}_N des permutations de $\{1, \dots, N\}$. Partant d'un trajet $\sigma \in \mathbb{E}$, on sélectionne au hasard deux villes i et j et on les échange. Si $i < j$, le nouveau trajet est donc $\sigma' = (\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_j, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_{j-1}, \sigma_i, \sigma_{j+1}, \dots, \sigma_N)$. Si $i = j$, $\sigma' = \sigma$ et sinon il existe une transposition τ telle que $\sigma' = \tau \circ \sigma$. Le nombre de permutations σ' auxquelles on peut accéder à partir de σ , que l'on appellera les voisins de σ , est donc $\frac{N(N-1)}{2} + 1$ et on prend comme matrice de transition

$$\begin{cases} Q(x, y) = \frac{2}{N^2} & \text{si } x \text{ et } y \text{ sont voisins et } x \neq y, \\ Q(x, x) = \frac{1}{N}, \\ Q(x, y) = 0 & \text{si } x \text{ et } y \text{ ne sont pas voisins.} \end{cases}$$

Cette matrice de transition est symétrique et nous allons vérifier qu'elle satisfait la condition de Doeblin. Toute permutation y peut s'écrire comme la composée de la permutation x et d'au plus $N - 1$ transpositions ; on a donc $y = \tau_{N-1} \circ \dots \circ \tau_1 \circ x$ où on désigne par τ_i , $1 \leq i \leq N - 1$ soit une permutation, soit l'identité. Comme dans les deux cas, z et $\tau_i \circ z$ sont voisins, on a $Q(z, \tau_i \circ z) \geq \frac{2}{N^2}$. On en déduit que $Q^{N-1}(x, y) \geq \left(\frac{2}{N^2}\right)^{N-1} = \alpha \mu(y)$ où μ est la probabilité uniforme sur \mathbb{E} et où $\alpha = N! 2^{N-1} N^{-2N+2}$. On voit d'ailleurs que Q est irréductible et apériodique. On pourra remarquer que la probabilité de transition « plus naturelle » définie par $\bar{Q}(x, y) = \frac{2}{N(N-1)}$ si x et y sont voisins et 0 sinon est symétrique, mais n'est pas apériodique et ne satisfait pas non plus la condition de Doeblin.

Notons Π_{β_n} la probabilité définie par $\Pi_{\beta_n}(x) = \frac{e^{-\beta_n V(x)}}{Z(\beta_n)}$, qui est la probabilité invariante de la chaîne de Markov homogène de matrice de transition P_n . Puisque la suite β_n converge vers $+\infty$, la suite de probabilités Π_{β_n} se concentre sur les points dont l'énergie V est proche du minimum m de V . Il faut donc contrôler la norme en variation totale de la différence $\nu_n - \Pi_{\beta_n}$. Si cette norme est petite, l'énergie de X_n sera également proche de m quelque soit l'état initial x_0 .

Théorème 6.19 Soit \mathbb{E} un ensemble fini, ν_0 une probabilité sur \mathbb{E} et Q une matrice de transition symétrique sur \mathbb{E} qui satisfait la condition de Doeblin (6.2). Pour tout entier $n \geq 1$, soit $\beta_n = \gamma \ln(n)$, P_n la matrice de transition définie par (6.12) et $\nu_n = \nu_0 P_1 \cdots P_n$. Il existe $\gamma_0 \in]0, +\infty[$ tel que :

(i) Pour tout $\gamma \in]0, \gamma_0[$ et toute loi initiale ν_0 on a

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \|\nu_n - \Pi_{\beta_n}\| = 0 \quad (6.13)$$

et si $m = \min\{V(x) : x \in \mathbb{E}\}$, pour tout $\varepsilon > 0$, $\lim_{n \rightarrow +\infty} P(V(X_n) \geq m + \varepsilon \mid X_0 = x) = 0$.

(ii) Si $\gamma > \gamma_0$, il existe $x \in \mathbb{E}$ tel que $\lim_{n \rightarrow +\infty} P(V(X_n) > m \mid X_0 = x) = 1$.

La démonstration repose sur les trois lemmes techniques suivants.

Lemme 6.20 Soit $\delta(V) = \max_{x \in \mathbb{E}} V(x) - \min_{x \in \mathbb{E}} V(x)$; on a pour tout β et β' :

$$\|\Pi_\beta - \Pi_{\beta'}\| \leq 2|\beta - \beta'| \delta(V).$$

Démonstration : La mesure Π_β est inchangée quand on remplace V par $V - m$, où $m = \min_{x \in \mathbb{E}} V(x)$. On peut donc supposer que $m = 0$ et que $V \geq 0$. Sans perte de généralité, on peut aussi supposer que $\beta \leq \beta'$, ce qui entraîne $(\beta' - \beta)V(x) \geq 0$. On en déduit que pour tout $x \in \mathbb{E}$:

$$|e^{-\beta V(x)} - e^{-\beta' V(x)}| \leq e^{-\beta V(x)} |1 - e^{-(\beta' - \beta)V(x)}| \leq (\beta' - \beta) \delta(V) e^{-\beta V(x)}.$$

En sommant sur $x \in \mathbb{E}$, puis en divisant par $Z(\beta)Z(\beta')$, on obtient :

$$|Z(\beta) - Z(\beta')| \leq \sum_{x \in \mathbb{E}} |e^{-\beta V(x)} - e^{-\beta' V(x)}| \leq (\beta' - \beta) \delta(V) Z(\beta),$$

$$\left| \frac{1}{Z(\beta)} - \frac{1}{Z(\beta')} \right| \leq (\beta' - \beta) \delta(V) \frac{1}{Z(\beta')}.$$

Puisque Π_β et $\Pi_{\beta'}$ sont des probabilités, on a :

$$\begin{aligned} \|\Pi_\beta - \Pi_{\beta'}\| &= \sum_{x \in \mathbb{E}} \left| \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta V(x)} - \frac{1}{Z(\beta')} e^{-\beta' V(x)} \right| \\ &\leq \sum_{x \in \mathbb{E}} |e^{-\beta V(x)} - e^{-\beta' V(x)}| \frac{1}{Z(\beta)} + \sum_{x \in \mathbb{E}} e^{-\beta' V(x)} \left| \frac{1}{Z(\beta)} - \frac{1}{Z(\beta')} \right| \\ &\leq (\beta' - \beta) \delta(V) \sum_{x \in \mathbb{E}} \frac{e^{-\beta V(x)}}{Z(\beta)} + (\beta' - \beta) \delta(V) \sum_{x \in \mathbb{E}} \frac{e^{-\beta' V(x)}}{Z(\beta')} \\ &\leq 2(\beta' - \beta) \delta(V). \quad \square \end{aligned}$$

Notons

$$\kappa = \max_{x, y \in \mathbb{E}} 1_{\{Q(x, y) > 0\}} (V(x) - V(y))^+$$

le saut maximum d'énergie possible entre deux instants pour une chaîne de Markov qui a Q comme matrice de transition. Alors :

Lemme 6.21 Soit Q une matrice de transition qui satisfait la condition de Doeblin (6.2) avec les constantes α et l . Pour tout couple de probabilités μ et μ' sur \mathbb{E} et pour tout entier $n \geq 1$ on a :

$$\|(\mu - \mu') P_{n+1} \cdots P_{n+l}\| \leq (1 - \alpha e^{-l \gamma \kappa \ln(n+l)}) \|\mu - \mu'\|.$$

Démonstration : Pour tout couple d'états $x \neq y$ et tout entier $k \geq 1$ on a :

$$P_k(x, y) = e^{-\beta_k (V(y) - V(x))^+} Q(x, y) \geq e^{-\beta_k \kappa} Q(x, y)$$

et puisque $P_k(x, y) \leq Q(x, y)$ si $x \neq y$,

$$P_k(x, y) = 1 - \sum_{y \neq x} P_k(x, y) \geq 1 - \sum_{y \neq x} Q(x, y) = Q(x, x) \geq e^{-\beta_k \kappa} Q(x, x).$$

On en déduit que $P_k(x, y) \geq e^{-\beta_k \kappa} Q(x, y)$ pour tout $x, y \in \mathbb{E}$. Puisque Q satisfait la condition de Doeblin :

$$P_{n+1} \cdots P_{n+l}(x, y) \geq e^{-(\beta_{n+1} + \cdots + \beta_{n+l}) \kappa} Q^l(x, y) \geq e^{-\gamma \kappa l \ln(n+l)} \alpha \mu(y).$$

Notons $Q' = P_{n+1} \cdots P_{n+l}$ et $\alpha' = e^{-\gamma \kappa l \ln(n+l)} \alpha$. Le raisonnement fait dans la démonstration du Théorème 6.6 pour $l = 1$ montre que $\|(\mu - \mu') Q'\| \leq (1 - \alpha') \|\mu - \mu'\|$. \square

Lemme 6.22 Soit $(z_k, k \geq 0)$ une suite telle que $z_0 \geq 0$ et $z_{k+1} \leq (1 - \alpha_k) z_k + b_k$ avec $\alpha_k \in]0, 1[$ et $b_k \geq 0$ pour tout entier $k \geq 0$. Notons $A_0 = 1$ et $A_k = \prod_{i=0}^{k-1} \frac{1}{1 - \alpha_i}$ pour tout $k \geq 1$. Alors pour tout entier $k \geq 1$, on a :

$$z_k \leq \frac{A_0 z_0}{A_k} + \frac{1}{A_k} \sum_{i=0}^{k-1} \frac{b_i}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i). \quad (6.14)$$

En particulier, si $\sum_{i \geq 1} \alpha_i = +\infty$ et $\frac{b_i}{\alpha_i} \rightarrow 0$ quand $i \rightarrow +\infty$, alors $\lim_{k \rightarrow +\infty} z_k = 0$.

Démonstration : Puisque $A_{k+1} > 0$, on a $A_{k+1} z_{k+1} \leq A_k z_k + A_{k+1} b_k$ pour tout entier $k \geq 1$. On en déduit par récurrence que

$$A_k z_k \leq A_0 z_0 + \sum_{i=0}^{k-1} A_{i+1} b_i.$$

La majoration (6.14) est alors une conséquence immédiate du fait que $A_{i+1} = \frac{1}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i)$. Si la série $\sum_i \alpha_i$ diverge, il en est de même du produit infini $\prod_i \frac{1}{1 - \alpha_i}$ et la suite A_k croit donc vers $+\infty$. Si le quotient b_i/α_i converge vers 0, pour tout $\varepsilon > 0$ il existe i_0 tel que $\frac{b_i}{\alpha_i} \leq \varepsilon$ si $i \geq i_0$. Notons M un majorant de la suite $\frac{b_i}{\alpha_i}$ puis k_0 un entier tel que $A_k^{-1} \leq \frac{\varepsilon}{M A_{i_0}}$ pour tout entier $k \geq k_0$. Alors pour tout $k \geq k_0$:

$$\frac{1}{A_k} \sum_{i=0}^{k-1} \frac{b_i}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i) \leq \frac{1}{A_k} M A_{i_0} + \varepsilon \frac{A_k - A_{i_0}}{A_k} \leq 2\varepsilon.$$

On en déduit que lorsque $k \rightarrow +\infty$, la suite $\frac{1}{A_k} \sum_{i=0}^{k-1} \frac{b_i}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i)$ converge vers 0, ce qui entraîne que la suite z_k converge vers 0. \square

Démonstration du Théorème 6.19 : Nous démontrerons seulement la partie (i) du Théorème 6.19 qui justifie la méthode et prouverons l'existence d'une constante γ'_0 , non optimale, telle que pour $0 < \gamma < \gamma'_0$, $\lim_n \|\nu_n - \Pi_{\beta_n}\| = 0$. Pour alléger les notation, notons Π_n pour Π_{β_n} où $\beta_n = \gamma \ln(n)$. Par définition, pour tout $n, k \geq 1$, $\nu_{n+k} = \nu_n P_{n+1} \cdots P_{n+k}$ et $\Pi_j = \Pi_j P_j$, d'où :

$$\begin{aligned} \nu_{n+k} - \Pi_{n+k} &= (\nu_n - \Pi_n) P_{n+1} \cdots P_{n+k} + (\Pi_n - \Pi_{n+1}) P_{n+1} \cdots P_{n+k} \\ &\quad + (\Pi_{n+1} - \Pi_{n+2}) P_{n+2} \cdots P_{n+k} + \cdots + (\Pi_{n+k-1} - \Pi_{n+k}) P_{n+k}. \end{aligned}$$

Si μ et μ' sont deux probabilités sur \mathbb{E} , on a

$$\begin{aligned} \|\mu P_j - \mu' P_j\| &\leq \sum_{y \in \mathbb{E}} \left| \sum_{x \in \mathbb{E}} (\mu(x) - \mu'(x)) P_j(x, y) \right| \\ &\leq \sum_{x \in \mathbb{E}} |\mu(x) - \mu'(x)| \sum_{y \in \mathbb{E}} P_j(x, y) = \|\mu - \mu'\|. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Le lemme 6.20 permet alors de déduire que

$$\begin{aligned} \|\nu_{n+k} - \Pi_{n+k}\| &\leq \|(\nu_n - \Pi_n) P_{n+1} \cdots P_{n+k}\| + \sum_{j=1}^k \|\Pi_{n+j-1} - \Pi_{n+j}\| \\ &\leq \|(\nu_n - \Pi_n) P_{n+1} \cdots P_{n+k}\| + 2\gamma \delta(V) \sum_{j=1}^k [\ln(n+j) - \ln(n+j-1)] \\ &\leq \|(\nu_n - \Pi_n) P_{n+1} \cdots P_{n+k}\| + 2\gamma \delta(V) \ln\left(\frac{n+k}{n}\right). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Il reste à majorer $\|(\nu_n - \Pi_n) P_{n+1} \cdots P_{n+k}\|$. Si l est l'entier de la condition de Doeblin, notons $z_k = \|\nu_{kl} - \Pi_{kl}\|$. L'inégalité précédente et le lemme 6.21 entraînent que

$$z_{k+1} \leq (1 - \alpha_k) z_k + b_k \quad \text{pour} \quad \alpha_k = \alpha e^{-\gamma \kappa l \ln[(k+1)l]} \quad \text{et} \quad b_k = 2\gamma \delta(V) \ln\left(\frac{k+1}{k}\right).$$

Il existe donc des constantes strictement positives c et c' telles que lorsque $k \rightarrow +\infty$, $\alpha_k \sim c k^{-\gamma \kappa l}$ et $\frac{b_k}{\alpha_k} \sim c' k^{\gamma \kappa l - 1}$, d'où $\sum_k \alpha_k = +\infty$ et $\lim_k \frac{b_k}{\alpha_k} = 0$ si $\gamma < \frac{1}{\kappa l}$. Le lemme 6.22 montre alors que $\lim_{k \rightarrow +\infty} \|\nu_{kl} - \Pi_{kl}\| = 0$. Pour tout $j = 1, \dots, l-1$, en appliquant j fois les inégalités (6.15) et (6.16) à $\|(\nu_{kl} - \Pi_{kl}) P_{kl+1} \cdots P_{kl+j}\|$, on déduit que

$$\|\mu_{kl+j} - \Pi_{kl+j}\| \leq \|\nu_{kl} - \Pi_{kl}\| + 2\delta(V) \ln\left(\frac{kl+j}{kl}\right),$$

ce qui entraîne $\lim_{n \rightarrow +\infty} \|\nu_n - \Pi_n\| = 0$. Puisque ν_n est la loi de X_n , la Proposition 6.18 permet de conclure la démonstration de (i). \square

Remarque 6.23 Pour $0 < \gamma < \gamma_0$, la vitesse de convergence de $P(V(X_n) \geq m + \varepsilon)$ est de la forme $O(n^{-\varepsilon \gamma + \delta})$ pour tout $\delta > 0$. Il faudrait donc prendre γ aussi proche que possible de γ_0 , mais cette valeur est très difficile à calculer. Elle dépend de V et aussi de la matrice Q choisie et il faut considérer que γ_0 est inconnue. De plus, pour les praticiens, un schéma de température logarithmique est trop lent et ils utilisent plus souvent des schémas de la forme $\beta_n = C n^\gamma$. En fait, pour un nombre fixé n_0 d'itérations, le schéma optimal est $\beta_n = a \ln(n_0) b^{n/n_0}$, avec des paramètres a et b qu'il faut considérer comme inconnus (cf. [3]).

Concrètement, on utilise une approche empirique en essayant divers schémas de température et en changeant éventuellement la matrice de transition Q . Une autre méthode consiste à laisser la température constante sur des paliers.

Définition 6.24 Soit $x \notin \mathcal{E}$. On dit que x communique avec \mathcal{E} à hauteur $h > 0$ s'il existe x_0, x_1, \dots, x_j tels que $x_0 = x, x_j \in \mathcal{E}$ et :

$$Q(x_i, x_{i+1}) > 0 \quad \forall i = 0, \dots, j-1 \quad \text{et}$$

$$V(x_i) \leq V(x) + h, \quad \forall i = 1, \dots, j.$$

La hauteur de communication h^* de V est la plus petite hauteur h à laquelle tout élément $x \notin \mathcal{E}$ communique avec \mathcal{E} à hauteur h .

Nous admettrons le résultat suivant de Hajek (1988).

Théorème 6.25 Pour l'algorithme du recuit simulé avec le schéma de température $T(n) = \frac{1}{\beta_n}$, on a $\lim_n P(X_n \in \mathcal{E}) = 1$ si et seulement si :

$$\lim_n \beta_n = +\infty \quad \text{et} \quad \sum_{n=1}^{+\infty} \exp(-h^* \beta_n) = +\infty.$$

La condition du Théorème 6.25 de Hajek est bien sûr vérifiée si $\beta_n = \gamma \ln(n)$ avec $\gamma \geq \frac{1}{h^*}$ et la convergence est rapide si h est proche de h^* . Deux problèmes se posent de nouveau : concrètement, la valeur de h^* est inconnue et on ne connaît pas le temps d'atteinte du minimum avec une précision donnée. Au lieu de recalculer β_n à chaque instant n , on le fixe sur des paliers de temps de plus en plus longs en imposant pour tout entier $k \geq 1$:

$$\beta_n = k \quad \text{pour tout} \quad n \in]e^{(k-1)h}, e^{kh}].$$

Si $h > h^*$, ces paliers de temps sont assez longs pour que loi de la chaîne définie par l'algorithme de Metropolis et ayant comme probabilité invariante la mesure de Gibbs $\tilde{\Pi}_k = \Pi_{\beta_n}$ pour $n \in]e^{(k-1)h}, e^{kh}]$ atteigne $\tilde{\Pi}_k$ à la fin du palier. Ainsi, pour $h > h^*$ la suite $\sup_{x \in \mathbb{E}} \sum_{y \in \mathbb{E}} |P_{\beta}^m(x, y) - \Pi(y)|$ converge vers 0 quand $k \rightarrow +\infty$. On pourra trouver des détails sur cette méthode et sur son implémentation dans [23].

Dans le cas du voyageur de commerce, le programme Scilab suivant vient de [5]. Il permet de trouver le trajet optimal avec $N = 50$ villes réparties de façon indépendante équidistribuée de loi uniforme dans le carré unité. La matrice Q décrite précédemment, ainsi qu'avec une matrice \tilde{Q} plus efficace. La matrice \tilde{Q} est définie de façon similaire à Q , avec une définition différente de trajets voisins. Pour toute permutation $\sigma \in \mathcal{S}_N$, les permutations voisines de σ sont les permutations $\tilde{\sigma}'$ déduites de σ en choisissant au hasard deux villes i et j , en les échangeant et en changeant le sens du parcours entre les villes i et j , c'est à dire en posant $\tilde{\sigma}' = (\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_j, \sigma_{j-1}, \dots, \sigma_{i+1}, \sigma_i, \sigma_{j+1}, \dots, \sigma_N)$ si $i < j$.

Le programme principal `recuit.sce` est le suivant. Pour l'exécuter, taper `exec recuit.sce` dans un terminal Scilab.

```
xset("default");
getf fonctionsrecuit.sci
// Nombre de villes
n=50;
//n=20;

// Villes aleatoires dans [0,1]^2
position=grand(n,2,'unf',0,1);

// Nombre d'iterations de l'algorithme
N=60000;
```

```

Long=zeros(1,N) ;

// Trajet initial=permutation aleatoire de {1, ... ,n}
trajet=grand(1,'prm',[1 :n]') ;

// fonction de temperature
function [beta]=schema_temp(k)
beta=k/200 ;
endfunction ;
h=longueur(trajet,position) ;
trajet_initial=trajet ;
trajet_optimal=trajet ;

for i=1 :N,
    n_trajet=trajet_voisin(trajet) ;
    n_h=longueur(n_trajet,position) ;
    if (n_h<h) then
        trajet=n_trajet ;
        h=n_h ;
        trajet_optimal=trajet ;
    elseif (grand(1,1,'unf',0,1)<%e-schema_temp(i)*(n_h-h)) then
        trajet=n_trajet ;
        h=n_h ;
        end ;
    Long(i)=h ;
end ;

trajetfinal=trajet ;

// Graphe de l'evolution de l'energie
fenetre=1 ;
xset('window',fenetre) ;
xbaso() ;
plot2d([1 :N],Long) ;
xtitle(['Evolution de la longueur du trajet']) ;

// Graphe des trajets
fenetre=2 ;
xset('window',fenetre) ;
xbaso() ;
xsetech([0.25,0,.5,.5])
dessin(trajet_initial,position) ;
xtitle(['trajet initial']) ;
xsetech([0.25,0.5,.5,.5])
dessin(trajet_optimal,position) ;
xtitle(['trajet obtenu par recuit apres 60000 iterations']) ;

```

Le programme principal fait appel au fichier de fonctions fonctionsrecuit.sci suivant.

On verra que deux versions de `trajetvoisin` sont données, la première avec la matrice Q et la seconde avec la matrice \tilde{Q} . Les graphes sont donnés avec la version du fichier qui correspond à \tilde{Q} , qui est plus efficace.

Le fichier `fonctionsrecuit.sci` est le suivant (avec la matrice \tilde{Q}) :

```
// Calcul d'un trajet voisin avec  $\tilde{Q}$ 
// par permutation de deux villes et
// retournement du trajet entre les deux villes
function [x]=trajet_voisin(y);
l=length(y);
i=grand(1,1,'uin',1,l);
j=grand(1,1,'uin',1,l);
x=y; z=y;
if (i-1<j) then
    x([i :j])=y([j :-1 :i]);
    else z=y([l :-1 :1]); x=z; x([l-i+2 :l-j])=z([l-j :-1 :l-i+2]);
end;
endfunction;

// Calcul de la longueur d'un trajet
function [h]=longueur(perm,position);
n_position=position(perm, :);
l=length(perm);
A=eye(l,l)-[zeros(1,1),eye(l,l-1)];
A(1,1)=-1;
B=A*n_position;
h=sqrt(sum(B.*B));
endfunction;

// Affichage d'un trajet
function dessin(trajet,position);
pos=position(trajet, :);
pos=[pos ;pos(1, :)];
plot2d(pos(:,1),pos(:,2),1,'000');
endfunction;
```

La fonction `trajet_voisin` peut éventuellement être remplacée par la suivante, qui se contente de permuter les villes i et j , ce qui correspond à la matrice Q .

```
// permutation de 2 villes
function [x]=trajet_voisin(y);
l=length(y);
i=grand(1,1,'uin',1,l);
j=grand(1,1,'uin',1,l);
x=y; z=y;
x([i,j])=y([j,i]);
endfunction;
```

FIG. 19 – Trajets pour 50 villes uniformément réparties dans un carré de façon indépendante

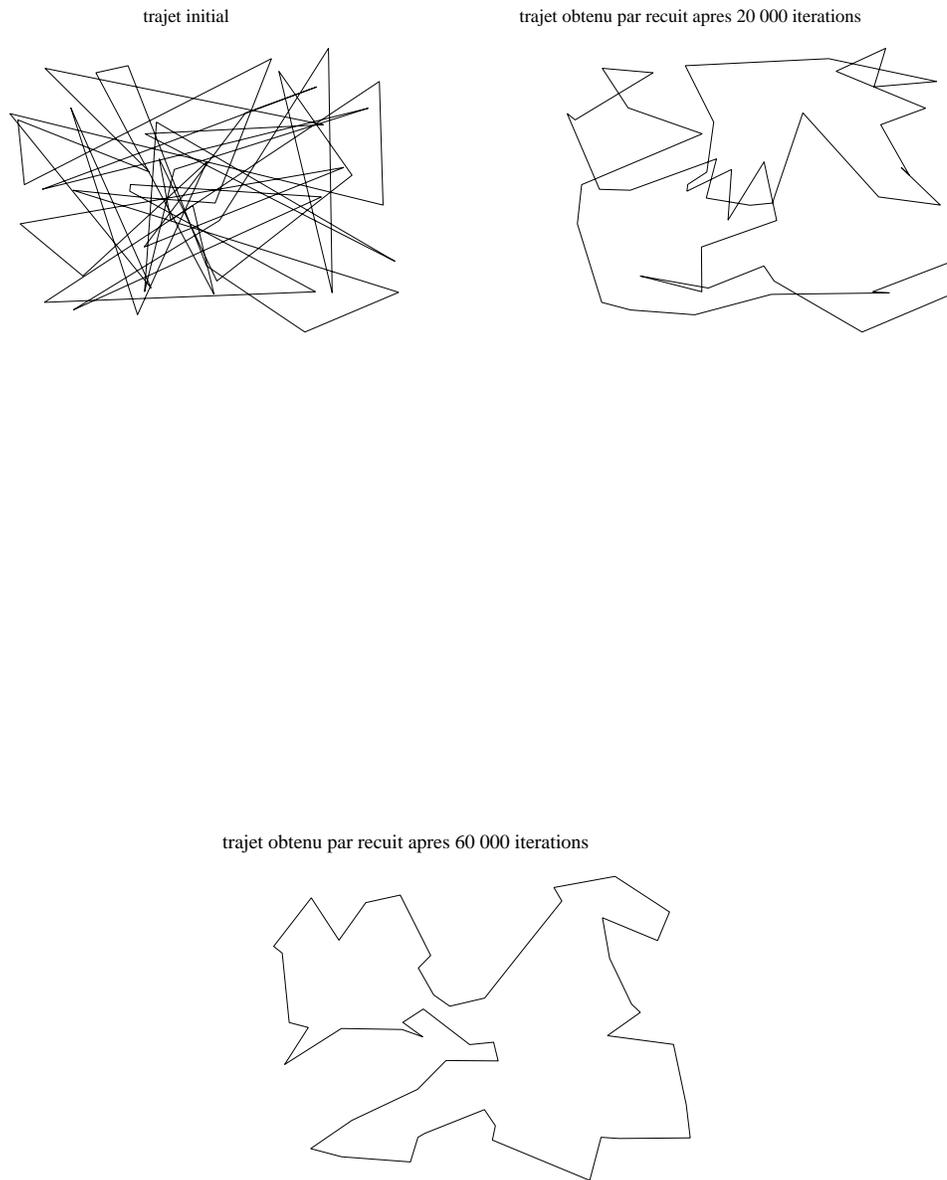
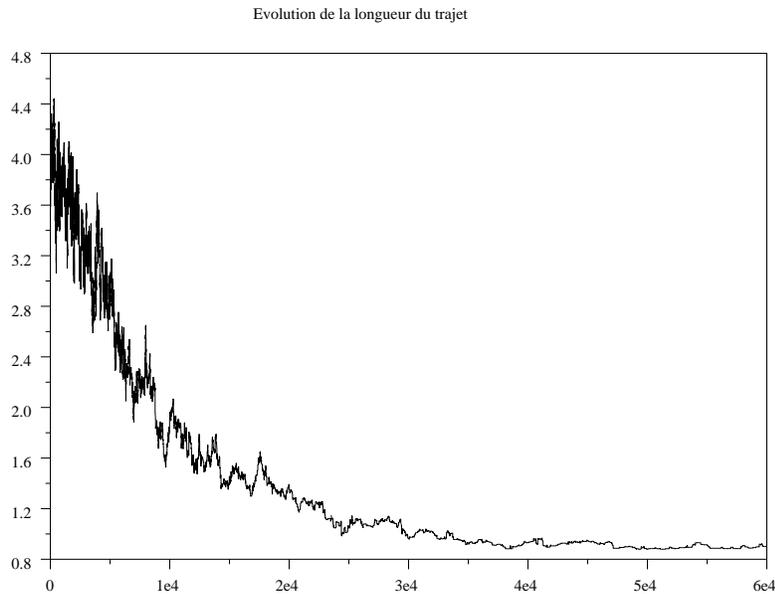


FIG. 20 – Évolution de la longueur du trajet au cours des 60 000 itérations



6.6 Exercices

Exercice 6.1 Reprendre les exercices 3.8 et 3.21 et calculer la période des états. Les résultats établis pouvaient-ils être prévus ?

Exercice 6.2 Démontrer l'inégalité (6.10).

Exercice 6.3 Soit \mathbb{E} un ensemble fini ou dénombrable, p et q des probabilités sur \mathbb{E} telles que $0 < p \leq Cq$ où q est facile à simuler. Soit $(Y_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes de même loi q et X_0 une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{E} indépendante de la suite (Y_n) . On définit la suite $(X_n, n \geq 0)$ par récurrence à partir de X_0 de la façon suivante :

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_{n+1} & \text{avec la probabilité } \frac{p(Y_{n+1})}{Cq(Y_{n+1})}, \\ X_n & \text{avec la probabilité } 1 - \frac{p(Y_{n+1})}{Cq(Y_{n+1})}. \end{cases}$$

1. En considérant une suite $(U_n, n \geq 1)$ de variables aléatoires indépendantes de loi $\mathcal{U}([0, 1])$ et indépendante de $(X_0, (Y_n))$, montrer que $X_{n+1} = f(X_n, U_{n+1}, Y_{n+1})$ et en déduire que (X_n) est une chaîne de Markov.
2. Calculer la probabilité de transition Q de cette chaîne.
3. Pour toute probabilité μ sur \mathbb{E} , calculer μQ et en déduire que la suite des lois de X_n converge vers une unique probabilité invariante égale à p .
4. Quel rapport y a-t-il entre cette chaîne de Markov et la méthode du rejet usuelle ?
5. Si \mathbb{E} est fini, approximer $\sum_x \Phi(x) p(x)$ pour une fonction $\Phi : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$. Que peut-on dire de la vitesse de convergence ?

Exercice 6.4 (Échantillonneur de Gibbs) Soit (X_1, \dots, X_d) un vecteur aléatoire prenant ses valeurs dans \mathbb{E}^d où \mathbb{E} est un ensemble fini et soit $p(x_1, \dots, x_d)$ la loi de ce vecteur.

On définit une chaîne de Markov $(X(n), n \geq 0)$ sur \mathbb{E}^d comme suit : si $X = X(n)$ est donné, on choisit au hasard un entier i compris entre 1 et d et on modifie la i ème coordonnée suivant la loi conditionnelle de X_i sachant $\{X_j = x_j, j \neq i\}$.

1. Montrer que la probabilité de transition de la chaîne $(X(n))$ est définie pour $\bar{x} = (x_j, 1 \leq j \leq d)$ et $\bar{y} = (x_1, \dots, x_{i-1}, y, x_{i+1}, \dots, x_d)$ pour un indice $i = 1, \dots, d$ par :

$$Q(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{1}{d} P(X_i = y | X_j = x_j, j \neq i).$$

et $Q(u, v) = 0$ sinon.

2. Donner un algorithme de simulation de la probabilité de transition $Q(\bar{x}, \bar{y})$ quand on sait simuler la loi conditionnelle $P(X_i = y | X_j = x_j, j \neq i)$.
3. Soit A un sous-ensemble de \mathbb{E}^d ; on cherche à simuler une variable aléatoire de loi

$$\frac{p(\bar{x}) \mathbb{1}_{\{\bar{x} \in A\}}}{P((X_1, \dots, X_d) \in A)}.$$

Écrire l'algorithme de Hastings Metropolis dans ce cas.

4. Que devient l'algorithme si $A = \mathbb{E}^d$?
5. Proposer un algorithme permettant de tirer d points uniformément répartis sur le cercle conditionnellement à ce que la distance minimum entre ces points soit $\delta > 0$.

Exercice 6.5 Écrire un algorithme de Metropolis pour la simulation des lois suivantes :

1. Loi sur l'ensemble de vecteurs d'entiers (k_1, \dots, k_d) dont la somme des composantes est n telle que la probabilité d'un vecteur soit proportionnelle à sa première coordonnée.
2. Loi sur l'ensemble des sous-ensembles à n éléments de $\{1, \dots, d\}$ telle que la probabilité d'un sous-ensemble soit proportionnelle à la somme de ses éléments.

Exercice 6.6 Soit $\mathbb{E} = \{0, 1\}^d$ l'ensemble des états dont les éléments sont notés $\eta = (\eta(i), 1 \leq i \leq d)$ avec $\eta(i) \in \{0, 1\}$. On dit que deux éléments de \mathbb{E} sont voisins s'ils diffèrent en une seule coordonnée $i \in \{1, \dots, d\}$; on en déduit alors un graphe dont les sommets sont les éléments de \mathbb{E} et tels que l'ensemble des arêtes A est caractérisé par le fait que :

$$\{\eta, \zeta\} \in A \quad \text{si et seulement si} \quad \sum_{i=1}^d |\eta(i) - \zeta(i)| = 1.$$

Fixons $\gamma \in [0, 1]$ et construisons la matrice de transition Q par :

$$Q(\eta, \zeta) = \begin{cases} \frac{\gamma}{d} & \text{si } \eta \text{ et } \zeta \text{ sont voisins,} \\ 1 - \gamma & \text{si } \eta = \zeta, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Pour $\gamma = 0$, Q est l'identité et pour $\gamma = 1$, Q est la matrice de la marche aléatoire symétrique sur le graphe précédent défini sur l'hypercube ; dans ce cas la période est 2.

Dans la suite, nous supposons que $0 < \gamma < 1$.

1. Pour tout $\xi \in \mathbb{E}$, notons $\chi_\xi : \mathbb{E} \rightarrow \{-1, +1\}$ le caractère défini par :

$$\chi_\xi(\eta) = (-1)^{\langle \xi, \eta \rangle}.$$

Montrer que la famille $(\chi_\xi, \xi \in \mathbb{E})$ est une base orthogonale de \mathbb{R}^{2^d} et calculer la norme de χ_ξ .

2. Montrer que χ_ξ est un vecteur propre de Q pour la valeur propre

$$\lambda_\xi = 1 - \frac{2\gamma}{d} \sum_{i=1}^d \xi(i).$$

3. En déduire que les valeurs propres de Q sont

$$1, 1 - \frac{2\gamma}{d}, 1 - \frac{4\gamma}{d}, \dots, 1 - 2\gamma,$$

la valeur propre $1 - \frac{2k\gamma}{d}$ étant d'ordre de multiplicité C_d^k .

4. Calculer $\alpha = \sup\{|\lambda_\xi| : \xi \in \mathbb{E}, \lambda_\xi \neq 1\}$.

Nous supposons désormais que $\gamma \leq \frac{d}{1+d}$ et considérons la base orthonormée de vecteurs propres ϕ_ξ définie par $\phi_\xi(\eta) = 2^{-\frac{d}{2}} \chi_\xi(\eta)$. Le but est d'évaluer la puissance de Q nécessaire pour que Q^n approxime la probabilité invariante avec une précision fixée.

5. Montrer que Q est irréductible apériodique et admet une probabilité invariante réversible. En utilisant l'équation (6.9), montrer que :

$$\sum_{\xi \in \mathbb{E}} 2^{-d} (2^d Q^m(\eta, \zeta) - 1)^2 < \varepsilon \quad \text{si} \quad m > d^2 \frac{\ln(2)}{4\gamma} - \frac{d}{4\gamma} \ln(\varepsilon).$$

6. En utilisant (6.8), montrer que :

$$\sum_{\xi \in \mathbb{E}} 2^{-d} (2^d Q^m(\eta, \zeta) - 1)^2 < \varepsilon \quad \text{si} \quad m > \frac{d \ln(d)}{4\gamma} - \frac{d}{4\gamma} \ln(\ln(1 + \varepsilon)).$$

L'ordre de grandeur du nombre de pas nécessaire est donc $\frac{d \ln(d)}{4\gamma}$ et est très inférieur au nombre d'états 2^d .

7. On considère la chaîne de Markov sur \mathbb{E} simulée par l'algorithme suivant :

```

k ← 0
Initialiser η
n ← 0
Répéter
    Choisir i de loi uniforme sur {1, ..., d}
    η(i) ← 1 - η(i)
    Si Random < 0.5
        Choisir j de loi uniforme sur {1, ..., d}
        η(j) ← 1 - η(j)
    Fin
    n ← n + 1
Jusqu'à n ≥ Palier
Jusqu'à l'arrêt de la simulation

```

Déterminer les valeurs propres de la matrice de transition Q de cette chaîne et évaluer la vitesse de convergence de Q^n vers sa probabilité invariante.

Références

- [1] N. Bouleau et D. Lepingue, Numerical methods for stochastic processes, Wiley Series in Probability and Mathematical statistics 1994.
- [2] Brent, R.P., Uniform random number generators for supercomputers, Proc. Fifth Australian Supercomputer Conference, Melbourne, December 1992, 95-104. Also Technical Report TR-CS-92-02, March 1992.
- [3] Catoni, O., Simulated annealing algorithms and Markov chains with rare transitions, Séminaire de probabilités XXXIII, Lecture Notes in Mathematics 1709, p. 69-119, 1999.
- [4] Chung, K.L., Markov chains with stationary transition probabilities, Springer Verlag, 1967.
- [5] Delmas, J.F., Jourdain, B., Cours de Modèles Aléatoires : maîtriser l'incertain, 2nde et 3ème années, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, avril 2003.
- [6] Doob, J.L., Classical Potential Theory and Its Probabilistic Counterpart, Springer Verlag, 1984.
- [7] Dufflo, M., Algorithmes stochastiques, Mathématiques et Applications, vol. 23, Springer Verlag, 1996.
- [8] Durrett, R., Brownian Motion and Martingales in Analysis, Wadsworth, Belmont, California, 1984.
- [9] Elie, L., Lapeyre, B., Introduction aux Méthodes de Monte Carlo, Cours de l'Ecole Polytechnique, Septembre 2001.
- [10] Friedman, A., Stochastic Differential Equations and Applications, Volume 1, Academic Press, 1975.
- [11] J.E. Gentle, Random Number Generation and Monte Carlo Methods, Statistics and Computing, Springer Verlag 1998.
- [12] Karatzas, I., Shreve, S.E., Brownian motion and Stochastic Calculus, Springer Verlag, 1991.
- [13] Kloeden, P., Platen, E., Numerical Solution of Stochastic Differential Equations, Applications of Mathematics, Stochastic Modelling and Applied Probability 23, Springer Verlag 1992.
- [14] Kloeden, P., Platen, E., Schurz, Numerical Solution of SDE through Computer Experiments, Universitext, Springer Verlag 1997.
- [15] Knuth, D.E., Seminumerical Algorithms, 2nd edition, vol. 2 of The Art of Computer Programming, Addison-Wesley, 1981.
- [16] Lapeyre, B., Pardoux, E., Sentis, R., Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion, Mathématiques et Applications 29, Springer Verlag 1998.
- [17] Lapeyre, B., Sulem, A., Talay, D., Understanding Numerical Analysis for Financial Models, Mai 2003, à paraître.
- [18] L'Ecuyer, P., Random numbers for simulation, Communications of the ACM, p. 33-10, 1990.
- [19] H. Neiderreiter, Random Number Generation and Quasi Monte Carlo Methods, Society for industrial mathematics, 1992.
- [20] Numerical Recipes in C, the art of scientific computing, Cambridge University Press 1992.
- [21] Petritis, N., [http ://perso.univ-rennes1.fr/dimitri.petritis/](http://perso.univ-rennes1.fr/dimitri.petritis/)

- [22] Talay, D., Tubaro, L., Expansion of the global error of numerical schemes solving stochastic differential equations, *Stochastic Analysis and Applications* 8(4), 1991, p. 94-120.
- [23] Ycart, B., *Modèles et Algorithmes Markoviens*, *Mathématiques et Applications* 39, Springer Verlag 2002.