Examen du cours de M2 : Méthodes numériques probabilistes

10 janvier 2017, 14h00-17h00.

Les notes de cours sont autorisées. La partie 2-B est facultative.

Exercice : Formule de Jarzynski discrète

Soit une fonction régulière $V : \left\{ \begin{array}{ccc} [0,1] \times \mathbb{R}^d & \to & \mathbb{R} \\ (\lambda, x) & \mapsto & V(\lambda, x) \end{array} \right.$. On note

$$Z_\lambda = \int_{\mathbb{R}^d} \exp(-V(\lambda, x))\, dx$$

que l'on suppose fini pour tout $\lambda \in [0,1]$. On introduit également la densité de probabilité sur $\mathbb{R}^d$

$$q_\lambda(x) = Z_\lambda^{-1} \exp(-V(\lambda, x)).$$

Dans toute la suite, on suppose que l'on sait tirer des variables aléatoires de manière indépendante selon la loi $q_0(x)\, dx$. L'objectif de cet exercice est d'analyser une méthode numérique pour calculer le rapport Z_1/Z_0.

1 Un premier estimateur de Z_1/Z_0 est donné par la variable aléatoire : pour $M \geq 1$,

$$I_M = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \exp(-V(1, X_0^m) + V(0, X_0^m))$$

où $(X_0^m)_{m \geq 0}$ désigne une suite i.i.d. de loi $q_0(x)\, dx$.

1.1 Vérifier que $\mathbb{E}(I_M) = Z_1/Z_0$ et donner un résultat de convergence quand $M \to \infty$.

1.2 On suppose dans cette question que $d = 1$, $V(0, x) = x^2/2$ et $V(1, x) = (x - L)^2/2$ pour $L \in \mathbb{R}$ fixé. Calculer la variance de l'estimateur I_M. Discuter l'asymptotique $L \to \infty$.

2 Quand les distributions $q_1(x)\, dx$ et $q_0(x)\, dx$ sont très différentes, la variance de l'estimateur I_M devient trop importante pour donner une approximation fiable. On considère alors une autre manière d'estimer Z_1/Z_0.

Pour tout $\lambda \in (0,1]$, on suppose que l'on dispose d'un noyau markovien $P_\lambda(x, dy)$ qui laisse $q_\lambda(x)\, dx$ invariante : pour tout fonction test $\varphi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$,

$$\int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \varphi(y) P_\lambda(x, dy) q_\lambda(x)\, dx = \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) q_\lambda(x)\, dx.$$

2.1 Rappeler quel algorithme peut être utilisé pour construire cette famille de noyau markovien.

Soit $N \geq 1$ un entier, et, pour $n \in \{0, \ldots, N\}$, $\lambda_n = \frac{n}{N}$. On considère la chaîne de Markov construite de la façon suivante : X_0 a pour loi $q_0(x)\, dx$ et pour $n \in \{1, \ldots, N-1\}$, conditionnellement à X_{n-1}, X_n a pour loi $P_{\lambda_n}(X_{n-1}, dy)$.

2.2 Donner la loi du N-uplet $(X_0, X_1, \ldots, X_{N-1})$.

On note
$$\mathcal{W} = \sum_{n=0}^{N-1} V(\lambda_{n+1}, X_n) - V(\lambda_n, X_n).$$

2.3 Montrer que $\mathbb{E}(\exp(-\mathcal{W})) = Z_1/Z_0$. En déduire une manière d'approcher Z_1/Z_0 par une méthode de Monte Carlo.

On suppose dans la suite que $d = 1$ et $V(\lambda, x) = (x - \lambda L)^2/2$ pour $L \in \mathbb{R}$ fixé. De plus, pour $\alpha > 0$ et $\lambda \in (0, 1]$ fixé, $P_\lambda(x, dy)$ est une gaussienne centrée en
$$m_\lambda^\alpha(x) = \frac{(1-\alpha)x + 2\alpha\lambda L}{(1+\alpha)}$$
et de variance (indépendante de x)
$$(\sigma_\lambda^\alpha)^2 = \frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2}.$$

2.4 Montrer que pour tout $\alpha > 0$, P_λ laisse $q_\lambda(x)\,dx$ invariante.

2.5 Vérifier que $Z_1/Z_0 = 1$. En montrant que $\mathcal{W}$ est une gaussienne, en déduire que
$$\mathrm{Var}(\exp(-\mathcal{W})) = \exp(\mathrm{Var}(\mathcal{W})) - 1.$$

2.6 Montrez que pour tout $n \in \{0, \ldots, N-1\}$, $\mathrm{Var}(X_n) = 1$, et pour tout $m < n$ avec $m, n \in \{0, \ldots, N-1\}$, $\mathrm{Cov}(X_m, X_n) = \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^{n-m}$.

2.7 En déduire que dans l'asymptotique $N \to \infty$, $\mathrm{Var}(\exp(-\mathcal{W})) \sim \frac{L^2}{\alpha N}$. Commenter le résultat obtenu en comparant au résultat de la question 1.2. *On pourra admettre ou vérifier que, dans la limite* $N \to \infty$, $\sum_{0 \le m < n \le N-1} \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^{n-m} \sim \frac{1-\alpha}{2\alpha} N$.

Problème : Une équation différentielle stochastique avec un coefficient de dérive singulier

Dans tout le problème, on travaille sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ muni d'une filtration $\mathcal{F} = (\mathcal{F}_t)_{t \ge 0}$ telle que $\mathcal{F}_0$ contient tous les ensembles $B \in \mathcal{A}$ qui vérifient $\mathbb{P}(B) = 0$. On se donne un mouvement brownien réel $\mathcal{F}$-adapté $(W_t)_{t \ge 0}$. *Les parties 1, 2-A et 2-B sont indépendantes.*

Partie 1 : Temps d'atteinte pour un mouvement brownien avec dérive constante

Soient $b > 0$ et $\sigma > 0$. Pour tout $x \ge 0$, on note $Y_t^x = x + bt + \sigma W_t$ et on définit $\tau^x = \inf\{t \ge 0 : Y_t^x = 0\}$.

1 Justifier que τ^x est un $\mathcal{F}$-temps d'arrêt.

2 Soit $\lambda > 0$. Déterminer l'unique solution u du problème

$$\begin{cases} \dfrac{\sigma^2}{2} u''(y) + bu'(y) = \lambda u(y), & y \geq 0, \\ u(0) = 1, & \end{cases}$$

qui reste *bornée* sur $[0, +\infty[$. Vérifier que u' est également bornée sur $[0, +\infty[$.

3 On définit $\phi(t, y) = \mathrm{e}^{-\lambda t} u(y)$. Montrer que le processus $(Z_t^x)_{t \geq 0}$ défini par $Z_t^x = \phi(t, Y_t^x)$ vérifie

$$\forall t \geq 0, \qquad Z_t^x = u(x) + \sigma \int_{s=0}^t \mathrm{e}^{-\lambda s} u'(Y_s^x) \mathrm{d}W_s.$$

4 Montrer que le processus $(H_s)_{s \geq 0}$ défini par $H_s = \mathrm{e}^{-\lambda s} u'(Y_s^x) \mathbf{1}_{\{s \leq \tau^x\}}$ est tel que $\mathbb{E} \int_0^\infty H_s^2 \, ds < \infty$. En déduire $\mathbb{E}\left(Z_{t \wedge \tau^x}^x\right)$ (on rappelle la notation $t \wedge \tau^x = \min(t, \tau^x)$).

5 En décomposant $Z_{t \wedge \tau^x}^x = \mathrm{e}^{-\lambda t \wedge \tau^x} u(Y_{t \wedge \tau^x}^x)$ sur les événements $\{\tau^x < +\infty\}$ et $\{\tau^x = +\infty\}$, montrer que $\lim_{t \to +\infty} \mathbb{E}\left(Z_{t \wedge \tau^x}^x\right) = \mathbb{E}\left(\mathrm{e}^{-\lambda \tau^x} \mathbf{1}_{\{\tau^x < \infty\}}\right)$.

6 En conclure que pour tout $\lambda > 0$,

$$\mathbb{E}\left(\mathrm{e}^{-\lambda \tau^x} \mathbf{1}_{\{\tau^x < \infty\}}\right) = \exp\left(-\frac{bx}{\sigma^2}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{2\lambda\sigma^2}{b^2}}\right)\right).$$

7 En déduire $\mathbb{P}(\tau^x < +\infty)$.

Partie 2 : Limite de petit bruit pour des EDO mal posées

Soient $\epsilon > 0$ et $b : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. On suppose pour le moment que b est lipschitzienne. Pour $x \in \mathbb{R}$ fixé, on note $(X_t^{x,\epsilon})_{t \geq 0}$ l'unique solution forte de l'EDS

$$\mathrm{d}X_t^{x,\epsilon} = b(X_t^{x,\epsilon})\mathrm{d}t + \sqrt{2\epsilon}\mathrm{d}W_t, \qquad X_0^{x,\epsilon} = x \tag{1}$$

et $(\xi_t^x)_{t \geq 0}$ l'unique solution du problème de Cauchy

$$\dot{\xi}_t^x = b(\xi_t^x), \qquad \xi_0^x = x. \tag{2}$$

8 Montrer que pour tout $T > 0$, $\lim_{\epsilon \to 0} \sup_{t \in [0,T]} \mathbb{E}\left(|X_t^{x,\epsilon} - \xi_t^x|\right) = 0$.

Le but du problème est d'étudier le comportement quand $\epsilon \to 0$ de la solution de (1) lorsque b n'est pas régulière et que (2) est mal posé. Dans la suite, on fixe des constantes réelles b_-, b_+, et on note b la fonction constante par morceaux définie par

$$b(x) = \begin{cases} b_+ & \text{si } x \geq 0, \\ b_- & \text{si } x < 0. \end{cases}$$

On admet que malgré la discontinuité de b, l'EDS (1) possède une unique solution forte $(X_t^{x,\epsilon})_{t\geq 0}$ pour tout $\epsilon > 0$. Par ailleurs, on appelle *solution du problème de Cauchy* $\dot{\xi}_t^0 = b(\xi_t^0)$, $\xi_0^0 = 0$, une fonction $(\xi_t^0)_{t\geq 0}$ continue telle que, pour tout $t \geq 0$,

$$\xi_t^0 = \int_{s=0}^t b(\xi_s^0)\mathrm{d}s.$$

Partie 2-A : Cas de non-existence. On suppose dans cette partie que $b_+ < 0 < b_-$.

9 Montrer qu'une solution du problème de Cauchy défini ci-dessus vérifie

$$\forall t \geq 0, \qquad (\xi_t^0)^2 = 2\int_{s=0}^t b(\xi_s^0)\xi_s^0\mathrm{d}s.$$

10 En déduire qu'il n'existe pas de telle solution.

11 En utilisant la formule d'Itô, montrer que pour tout $T > 0$,

$$\lim_{\epsilon\to 0} \sup_{t\in[0,T]} \mathbb{E}\left((X_t^{0,\epsilon})^2\right) = 0.$$

On souhaite calculer la limite, quand $\epsilon \to 0$, du temps passé par le processus $(X_t^{0,\epsilon})_{t\in[0,T]}$ dans le domaine $[0, +\infty[$. On introduit donc la variable aléatoire

$$\eta_T^\epsilon = \int_{s=0}^T \mathbf{1}_{\{X_s^{0,\epsilon}\geq 0\}}\mathrm{d}s,$$

et on définit le processus $(\tilde{X}_t^{0,\epsilon})_{t\geq 0}$ par $\tilde{X}_t^{0,\epsilon} = \epsilon^{-1}X_{\epsilon t}^{0,\epsilon}$.

12 Soit $(\tilde{X}_t^0)_{t\geq 0}$ la solution de l'équation différentielle stochastique :

$$\tilde{X}_t^0 = \int_0^t b(\tilde{X}_s^0)\mathrm{d}s + \sqrt{2}\tilde{W}_t.$$

où $(\tilde{W}_t)_{t\geq 0}$ est un mouvement brownien. En utilisant le fait que cette équation différentielle stochastique admet une unique solution en loi, montrer que $(\tilde{X}_t^{0,\epsilon})_{t\geq 0}$ a même loi que $(\tilde{X}_t^0)_{t\geq 0}$.

13 On admet que toute mesure invariante pour le processus $(\tilde{X}_t^0)_{t\geq 0}$ admet une densité de classe C^2 par rapport à la mesure de la Lebesgue. Montrer que $(\tilde{X}_t^0)_{t\geq 0}$ possède une unique mesure invariante μ sur $\mathbb{R}$, dont on calculera la densité.

14 Exprimer η_T^ϵ en fonction de $(\tilde{X}_t^{0,\epsilon})_{t\geq 0}$.

15 En admettant une propriété d'ergodicité sur le processus $(\tilde{X}_t^0)_{t\geq 0}$, conclure que η_T^ϵ converge en probabilité, quand $\epsilon \to 0$, vers une constante dont on précisera la valeur.

Partie 2-B : Cas de non-unicité - *Partie facultative.* On suppose dans cette partie que $b_+ > 0 > b_-$.

16 Montrer que le problème de Cauchy $\dot\xi^0_t = b(\xi^0_t)$, $\xi^0_0 = 0$, possède une solution $(\xi^{0,+}_t)_{t\geq 0}$ telle que $\xi^{0,+}_t > 0$ pour tout $t > 0$, et une solution $(\xi^{0,-}_t)_{t\geq 0}$ telle que $\xi^{0,-}_t < 0$ pour tout $t > 0$.

Fixons $\delta > 0$. Pour $x \in [-\delta, \delta]$, on note $\tau^{x,\epsilon}_{\pm\delta} = \inf\{t \geq 0 : X^{x,\epsilon}_t = \pm\delta\}$. On admet qu'un raisonnement similaire à celui décrit dans la première partie du problème permet de montrer que la fonction $v(x) = \mathbb{P}(\tau^{x,\epsilon}_{\delta} < \tau^{x,\epsilon}_{-\delta})$ est C^1, C^2 par morceaux, et vérifie le problème

$$\begin{cases} \epsilon v''(x) + b(x)v'(x) = 0, & x \in [-\delta, \delta], \\ v(-\delta) = 0 \text{ et } v(\delta) = 1. \end{cases}$$

Par ailleurs, la fonction $w(x) = \mathbb{E}\left(\tau^{x,\epsilon}_{\delta} \wedge \tau^{x,\epsilon}_{-\delta}\right)$ est, C^1, C^2 par morceaux, et vérifie le problème

$$\begin{cases} \epsilon w''(x) + b(x)w'(x) = -1, & x \in [-\delta, \delta], \\ w(-\delta) = 0 \text{ et } w(\delta) = 0. \end{cases}$$

17 Montrer que

$$\mathbb{P}(\tau^{0,\epsilon}_{\delta} < \tau^{0,\epsilon}_{-\delta}) = \left(1 - \frac{b_-(1 - \mathrm{e}^{-b_+\delta/\epsilon})}{b_+(1 - \mathrm{e}^{b_-\delta/\epsilon})}\right)^{-1}.$$

On note $q(\epsilon, \delta)$ cette quantité.

18 *(Question calculatoire que l'on pourra admettre en première lecture.)* Montrer que

$$\lim_{\epsilon \to 0} \mathbb{E}\left(\tau^{0,\epsilon}_{\delta} \wedge \tau^{0,\epsilon}_{-\delta}\right) = \frac{2\delta}{b_+ - b_-}.$$

19 Fixons $T > 0$ et définissons, pour tout $t \in [0, T]$,

$$\theta^\epsilon_t = \int_{s=0}^t \mathbf{1}_{\{X^{0,\epsilon}_s \geq 0\}} \mathrm{d}s.$$

Noter que $\theta^\epsilon_t \in [0, t]$. On introduit par ailleurs $\bar\tau^\epsilon_\delta$ le temps d'arrêt $\tau^{0,\epsilon}_{\delta} \wedge \tau^{0,\epsilon}_{-\delta} \wedge T$. Montrer que

$$\mathbb{P}(\theta^\epsilon_T \geq T - \bar\tau^\epsilon_\delta) \geq \mathbb{P}(\theta^\epsilon_T \geq T - \bar\tau^\epsilon_\delta, \tau^{0,\epsilon}_{\delta} < \tau^{0,\epsilon}_{-\delta}) \geq \mathbb{P}(\tau^{0,\epsilon}_{\delta} < \tau^{0,\epsilon}_{-\delta} \text{ et } \forall t \geq \tau^{0,\epsilon}_{\delta}, X^{0,\epsilon}_t > 0),$$
$$\mathbb{P}(\theta^\epsilon_T \leq \bar\tau^\epsilon_\delta) \geq \mathbb{P}(\theta^\epsilon_T \leq \bar\tau^\epsilon_\delta, \tau^{0,\epsilon}_{\delta} > \tau^{0,\epsilon}_{-\delta}) \geq \mathbb{P}(\tau^{0,\epsilon}_{\delta} > \tau^{0,\epsilon}_{-\delta} \text{ et } \forall t \geq \tau^{0,\epsilon}_{-\delta}, X^{0,\epsilon}_t < 0).$$

20 Le processus $(X^\epsilon_t)_{t\geq 0}$ possède la propriété de Markov forte, ce qui implique que, conditionnellement à l'événement $\{\tau^{0,\epsilon}_{\delta} < +\infty\}$:

— les événements $\{\tau^{0,\epsilon}_{\delta} < \tau^{0,\epsilon}_{-\delta}\}$ et $\{\forall t \geq \tau^{0,\epsilon}_{\delta}, X^{0,\epsilon}_t > 0\}$ sont indépendants ;

— les processus $(X^{0,\epsilon}_{s+\tau^{0,\epsilon}_{\delta}})_{s\geq 0}$ et $(X^{\delta,\epsilon}_s)_{s\geq 0}$ ont même loi.

Déduire de cette propriété et des résultats de la première partie que

$$\mathbb{P}(\theta_T^\epsilon \geq T - \bar{\tau}_\delta^\epsilon) \geq (1 - \mathrm{e}^{-b_+\delta/\epsilon}) q(\epsilon, \delta) \text{ et } \mathbb{P}(\theta_T^\epsilon \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon) \geq (1 - \mathrm{e}^{b_-\delta/\epsilon})(1 - q(\epsilon, \delta)).$$

21 *(Question plus difficile.)* Montrer que

$$\lim_{\delta\to 0} \liminf_{\epsilon\to 0} \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \theta_T^\epsilon \geq T - \bar{\tau}_\delta^\epsilon) = \lim_{\delta\to 0} \limsup_{\epsilon\to 0} \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \theta_T^\epsilon \geq T - \bar{\tau}_\delta^\epsilon) = \frac{b_+}{b_+ - b_-}$$

et

$$\lim_{\delta\to 0} \liminf_{\epsilon\to 0} \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \theta_T^\epsilon \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon) = \lim_{\delta\to 0} \limsup_{\epsilon\to 0} \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \theta_T^\epsilon \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon) = \frac{-b_-}{b_+ - b_-}.$$

En déduire que

$$\lim_{\delta\to 0} \limsup_{\epsilon\to 0} \left| \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \theta_T^\epsilon \geq T - \bar{\tau}_\delta^\epsilon) - \frac{b_+}{b_+ - b_-} \right| = 0,$$

$$\lim_{\delta\to 0} \limsup_{\epsilon\to 0} \left| \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \theta_T^\epsilon \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon) - \frac{-b_-}{b_+ - b_-} \right| = 0,$$

et

$$\lim_{\delta\to 0} \limsup_{\epsilon\to 0} \mathbb{P}(\bar{\tau}_\delta^\epsilon < T/2, \bar{\tau}_\delta^\epsilon < \theta_T^\epsilon < T - \bar{\tau}_\delta^\epsilon) = 0.$$

22 Montrer que, sur l'événement $\{\theta_T^\epsilon \geq T - \bar{\tau}_\delta^\epsilon\}$, on a $\sup_{t\in[0,T]} |\theta_t^\epsilon - t| \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon$, et que sur l'événement $\{\theta_T^\epsilon \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon\}$, on a $\sup_{t\in[0,T]} |\theta_t^\epsilon| \leq \bar{\tau}_\delta^\epsilon$.

23 Soit $F : C([0,T]) \to \mathbb{R}$ une fonction bornée et lipschitzienne. Montrer que $\mathbb{E}\left(F((\theta_t^\epsilon)_{t\in[0,T]})\right)$ converge, quand $\epsilon \to 0$, vers $\mathbb{E}\left(F((\bar{\theta}_t)_{t\in[0,T]})\right)$, où $(\bar{\theta}_t)_{t\in[0,T]}$ est le processus défini par

$$\forall t \in [0,T], \qquad \bar{\theta}_t = \rho t,$$

avec ρ une variable aléatoire de Bernoulli dont on précisera le paramètre $q \in]0,1[$. On rappelle que d'après le théorème de Portmanteau, ce résultat implique que le processus $(\theta_t^\epsilon)_{t\in[0,T]}$ converge en loi vers $(\bar{\theta}_t)_{t\in[0,T]}$.

24 Pour tout $t \in [0,T]$, exprimer $X_t^{0,\epsilon}$ en fonction de θ_t^ϵ. Conclure que le processus $(X_t^{0,\epsilon})_{t\in[0,T]}$ converge en loi, quand $\epsilon \to 0$, vers un processus aléatoire que l'on exprimera en fonction de $(\xi_t^{0,+})_{t\in[0,T]}$, $(\xi_t^{0,-})_{t\in[0,T]}$ et ρ.