Méthodes numériques probabilistes.

Tony Lelièvre
Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

Résumé

Ce cours est une introduction aux probabilités avec deux objectifs : comprendre le langage des probabilités qui intervient dans de nombreux modèles (physique statistique, mécanique quantique, chimie, biologie, finance) et présenter quelques méthodes numériques probabilistes qui peuvent notamment être utilisées pour résoudre des problèmes déterministes (résolution d'équations aux dérivées partielles, calcul de la première valeur propre d'un opérateur). On s'attachera à présenter les concepts essentiels fondant les méthodes de Monte Carlo, les chaînes de Markov, les processus de diffusion et leurs liens avec les équations aux dérivées partielles. On mettra l'accent sur les aspects concrets et modernes des probabilités appliquées. Plusieurs applications illustreront le cours, notamment en physique statistique (méthodes d'échantillonnage d'une mesure de Boltzmann-Gibbs) et en dynamique moléculaire (énergie libre, formule de Jarzynski). Quelques applications en biologie moléculaire seront mentionnées.

Plan

1. Variables aléatoires (rappels et compléments)
   (a) Introduction : le cas d'un espace de probabilité fini
   (b) Espace probabilisé et espérance
   (c) Variables aléatoires discrètes
   (d) Variables aléatoires continues
   (e) Notions de convergence et théorèmes limites
   (f) Méthode de Monte Carlo et réduction de variance
2. Chaînes de Markov à temps discret et à espace d'états fini
   (a) Définition et premières propriétés (équation de Chapman-Kolmogorov, réversibilité)
   (b) Comportement asymptotique (loi des grands nombres, théorème central limite et théorèmes ergodiques)
   (c) Méthodes Markov Chain Monte Carlo (algorithme de Metropolis-Hastings, recuit simulé)
3. Processus de diffusion
   (a) Processus aléatoire et mouvement Brownien (espace de Wiener)
   (b) Intégrale stochastique et calcul d'Itô (filtration, variation quadratique, équation de Langevin)
   (c) Equations différentielles stochastiques (existence, unicité, formule de Tanaka)

(d) Processus de diffusion et équations aux dérivées partielles (formule de Feynman-Kac, équation de Fokker-Planck, inégalité de Poincaré et convergence vers l'équilibre)

(e) Discrétisation des équations différentielles stochastiques (schéma d'Euler, convergence faible, convergence forte)

Références

[1] M. Benaïm and N. El Karoui. *Promenade aléatoire : Chaînes de Markov et simulations ; martingales et stratégie*. Ecole Polytechnique, 2005. In French.

[2] F. Comets and T. Meyre. *Calcul stochastique et modèles de diffusion*. Dunod, 2006. In French.

[3] J.-F. Delmas and B. Jourdain. *Modèles aléatoires*. Springer, 2006. In French.

[4] X. Guyon. Méthodes numériques par chaînes de markov, 1999. In French. Available at `ftp ://samos.univ-paris1.fr/pub/SAMOS/cours/guyon/ecoleete.ps`.

[5] J. Jacod and P. Protter. *Probability essentials*. Springer, 2000.

[6] B Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis. *Introduction to Monte-Carlo methods for transport and diffusion equations*. Oxford University Press, 2003. In French.

Prérequis

On supposera acquis les fondements de la théorie de la mesure et de l'intégration. Les prérequis en probabilités sont très faibles. Des rappels lors des deux premières séances devront permettre de bien aborder la suite du cours.