

SIMULATION STOCHASTIQUE PAR TRAJECTOIRES HAMILTONIENNES.

CHRISTIAN LAJAUNIE

1. CONTEXTE

On suppose une fonction potentiel $U : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ définie sur un espace d'état \mathcal{X} , telle que $\exp(-U(x))$ soit intégrable sur \mathcal{X} , et on pose :

$$K^{-1} = \int_{\mathcal{X}} \exp(-U(x)) dx < \infty$$

La densité de probabilité de Gibbs associée à ce potentiel est :

$$\pi(x) = K \exp(-U(x))$$

On est dans cette situation dans le traitement bayésien de problèmes inverses. A l'état x est associé une observation y , via un opérateur T , en général non linéaire, mais parfaitement connu. Un cas typique est celui dans lequel x représente les coefficients, et éventuellement les conditions limites, d'une EDP dont la forme est donnée. Si la mesure z est affectée d'une erreur gaussienne de covariance Σ , et si d'autre part à x est associé un prior $\Omega(x)$, alors la densité a-posteriori de x sachant z admet le potentiel :

$$U(x) = \frac{1}{2} \|z - T(x)\|_{\Sigma^{-1}}^2 - \log \Omega(x)$$

(pour alléger l'écriture, on ne fait pas figurer explicitement z par la suite, qui reste donc sous-entendu). Une problématique générale dans ce contexte est de produire des simulations de réalisations de cette loi. Par rapport aux méthodes qui visent simplement à estimer x par minimisation du potentiel, la simulation stochastique présente l'avantage de proposer des scénarios compatibles avec ce que l'on sait (la mesure z et le prior Ω) et donc d'illustrer l'incertitude résiduelle.

Dans le cas de systèmes différentiels, ou d'équations aux dérivées partielles linéaires, les méthodes d'état adjoint permettent une évaluation de ∇T , et donc de ∇U , au prix de la résolution d'un système adjoint similaire à celui définissant T . Il est alors intéressant de tirer parti du gradient pour orienter les transitions d'une simulation par chaîne de Markov vers les valeurs de plus forte vraisemblance. Un autre avantage par rapport à un échantillonneur de Gibbs est le parallélisme de transitions qui modifient tous les paramètres simultanément, ce qui devrait conduire à diminuer le nombre d'évaluations de U requises pour un même niveau de précision. L'algorithme de Langevin permet déjà de réaliser ce programme, mais la simulation hamiltonienne offre d'avantage de souplesse. On suppose donc par la suite que l'on a affaire à un potentiel différentiable.

2. SIMULATION HAMILTONIENNE

La démarche consiste à associer à \mathcal{X} un espace auxiliaire de même dimension, \mathcal{Y} , sur lequel on se donne une fonction énergie $E(y)$. L'hamiltonien que l'on considère est défini sur $X \times Y$ comme la somme des deux termes d'énergie :

$$H(x, y) = U(x) + E(y)$$

L'idée sera de générer des simulations de la loi conjointe $K_Z \exp -H(x, y)$, et de récupérer sur la composante x une simulation de $\pi(x)$. On va s'intéresser à des trajectoires vérifiant :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} x_t &= \nabla E \\ \frac{d}{dt} y_t &= -\nabla U \end{cases}$$

Ce qui amène une nouvelle contrainte sur le potentiel : le gradient du potentiel doit être lipschitzien. Le long de telles trajectoires l'hamiltonien est conservé :

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x}(H) \times \frac{dx}{dt} + \frac{\partial}{\partial y}(H) \times \frac{dy}{dt} \\ &= \nabla U \frac{dx}{dt} + \nabla E \frac{dy}{dt} = 0 \end{aligned}$$

On peut vérifier que les volumes dans l'espace des phases sont aussi conservés (cette propriété est trivialement vérifiée pour la version discrétisée de l'équation de flot, comme on va le voir). Ces deux propriétés, jointes à la réversibilité du flot, impliquent que la loi de Gibbs est invariante. Autrement dit, si le vecteur $u = (x, y)$ est une réalisation de $f(u) = K \exp(-H(u))$, et que le flot hamiltonien fait passer de u à $v = \phi_t(u)$ alors v est encore une réalisation de la loi cible f .

Lemma. *La loi de Gibbs est invariante dans le flot hamiltonien.*

Démonstration. Pour le voir, il suffit de s'assurer que la loi conjointe de u et v a une expression symétrique en ses arguments. En effet si la loi de transition $u \rightarrow v$ est donnée par $P(u, dv)$, la condition :

$$f(u) P(u, dv) du = f(v) P(v, du) dv$$

conduit, par intégration sur u (en se souvenant du fait qu'une probabilité de transition vérifie $\forall v, \int_u P(v, du) = 1$), à :

$$\int_u f(u) P(u, dv) du = f(v) dv$$

Ici, nous envisagerons un suivi pendant un intervalle de temps Δt , dont la direction est randomisée. Je note ϕ_+ le flot dans le sens croissant (défini arbitrairement) et ϕ_- dans le sens opposé. Nous avons :

$$P(u, dv) = \frac{1}{2} \{ \delta_{\phi_+(u)} + \delta_{\phi_-(u)} \} (dv)$$

et, si u suit la loi de Gibbs :

$$f(u) P(u, dv) du = K \exp(-H(u)) \frac{1}{2} \{ \delta_{\phi_+(u)}(dv) + \delta_{\phi_-(u)}(dv) \} du$$

Considérons le premier terme :

$$K \exp(-H(u)) \frac{1}{2} \delta_{\phi_+(u)}(dv) du$$

On a l'identité :

$$\exp(-H(u)) \frac{1}{2} \delta_{\phi_+(u)}(dv) du = \exp(-H(v)) \frac{1}{2} \delta_{\phi_-(v)}(du) dv$$

Le plus simple pour voir comment on obtient ce résultat est d'intégrer une fonction test $\psi(u, v)$:

$$I = \int \psi(u, v) \exp(-H(u)) \frac{1}{2} \delta_{\phi_+(u)}(dv) du = \int_u \psi(u, \phi_+(u)) \exp(-H(u)) du$$

On fait ensuite le changement de variables :

$$u = \phi_-(v)$$

ce qui est possible du fait des propriétés du flot, et on arrive à :

$$I = \int_v \psi(\phi_-(v), v) \exp[-H(\phi_-(v))] \left| \frac{D\phi_-}{Dv} \right| dv$$

La conservation de l'hamiltonien entraîne

$$\exp[-H \circ \phi_-(v)] = \exp[-H(v)]$$

et celle des volumes :

$$\left| \frac{D\phi_-}{Dv} \right| = 1$$

Il reste :

$$I = \int \psi(u, v) \exp(-H(v)) \delta_{\phi_-(v)}(du) dv$$

ce qui suffit à montrer l'identité. La même relation s'appliquant au second terme, on a finalement la relation de symétrie annoncée :

$$f(u) P(u, dv) du = f(v) P(v, du) dv$$

□

Cette propriété d'invariance ne suffit pas. On a besoin de propriétés de convergence, qui ne sont possibles que si des éléments stochastiques sont introduits. Ces éléments aléatoires seront introduits par le biais de l'impulsion y , dont la simulation est élémentaire. D'autre part, le suivi de flot hamiltonien n'est pas possible exactement en général, et il est nécessaire d'utiliser des schémas numériques. Le paragraphe suivant considère le schéma leap-frog. D'autres schémas seront considérés ensuite.

3. SCHÉMA NUMÉRIQUE, ET ALGORITHME STOCHASTIQUE.

Pour simuler approximativement une telle trajectoire, l'algorithme leapfrog peut être utilisé. Cet algorithme vient en deux versions, selon que l'on commence par modifier x ou y . Une étape de la seconde version de cet algorithme est la composition de trois pas élémentaires (figure 3.1) :

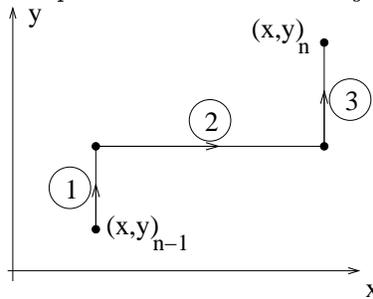
- (1) déplacement de y , dans la direction donnée par le gradient de $U(x)$:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} x \\ y - \frac{1}{2}\epsilon \nabla U(x) \end{pmatrix}$$

- (2) déplacement de x :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} x + \epsilon \nabla E(y) \\ y \end{pmatrix}$$

FIG. 3.1. Les trois pas d'une itération de l'algorithme leap-frog



(3) Nouveau déplacement de y :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y - \frac{1}{2}\epsilon \nabla U(x) \end{pmatrix}$$

Si T_ϵ est la composition de ces trois déplacements, alors on a $T_\epsilon^{-1} = T_{-\epsilon}$, ce qui a nécessité de décomposer en deux (étapes 1 et 3) le déplacement de y . Une autre propriété de cet algorithme est la conservation du volume dans l'espace des phases. En effet, considérons dans le premier déplacement, un volume A donné par :

$$A = \int_x \int_{y_i(x)}^{y_s(x)} dy dx = \int_x (y_s(x) - y_i(x)) dx$$

or la transformation des bornes pour une abscisse donnée x se traduit par l'ajout d'une constante : $y_s(x) \rightarrow y_s(x) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x)$, ce qui implique que la longueur $y_s(x) - y_i(x)$ est conservée dans la transformation, et ce qui ensuite entraîne la conservation du volume A . Le même raisonnement s'applique aux deux autres transformations, ce qui montre la conservation des volumes par T_ϵ . Une autre manière de voir ce résultat est de considérer le déterminant du Jacobien de la première transformation :

$$\begin{vmatrix} I & 0 \\ -\frac{\epsilon}{2} \nabla^2 U & I \end{vmatrix} = 1$$

Le même résultat appliqué aux deux autres étapes, conduit à $|\nabla T_\epsilon| = 1$.

Si la conservation de volume est exacte dans la version discrétisée par leap-frog de l'équation d'évolution, l'hamiltonien n'est conservé que de manière approchée. Il faut corriger une simulation de trajectoire si on veut conserver la loi stationnaire $K \exp(-H(x, y))$, en appliquant une probabilité d'acceptation, selon la dynamique de Métropolis. On vérifie que la loi cible est bien loi stationnaire du processus, par l'argument de symétrie déjà utilisé.

Par rapport à la situation précédente, l'approximation du schéma numérique et la dynamique de Métropolis, conduisent à loi conjointe suivante, si on note T_ϵ l'approximation numérique du flot :

$$P(du, dv) = P(du) \{P_{acc}(u, v) \delta_{T_\epsilon(u)}(dv) + (1 - P_{acc}(u, v)) \delta_u(dv)\}$$

ce qui traduit le fait que la transition $u \rightarrow v$ est acceptée avec une probabilité $P_{acc}(u, v) = \min(1, \exp(-H(v) + H(u)))$, l'alternative étant de rester en u (avec la

probabilité complémentaire). La seconde contribution étant évidemment symétrique en u et v , on peut se limiter à examiner la première :

$$\begin{aligned} P(du) P_\epsilon(u, dv) P_{acc}(u, v) &= K \exp(-H(u)) \delta_{T_\epsilon(u)}(dv) \\ &\quad \times \{1 \wedge \exp(-H(v) + H(u))\} du \\ &= K \{\exp -H(u) \wedge \exp -H(v)\} \delta_{T_\epsilon(u)}(dv) du \end{aligned}$$

Mais les propriétés d'inversibilité de T , et le fait que la jacobien ait un déterminant unité donnent par l'argument de changement de variables vu précédemment :

$$\delta_{T_\epsilon(u)}(dv) du = \delta_{T_\epsilon(v)}(du) dv$$

Ce qui veut dire que :

$$P(du) P_\epsilon(u, dv) P_{acc}(u, v) = P(dv) P_{-\epsilon}(v, du) P_{acc}(v, u)$$

Si maintenant le sens de parcours est randomisé selon une loi symétrique, $P_\epsilon(u, dv)$ est remplacé par

$$\frac{1}{2} \{P_\epsilon(u, dv) + P_{-\epsilon}(u, dv)\}$$

on a bien en définitive une expression symétrique en u et v . Remarquons que le fait d'adopter un échantillonneur aléatoire pur pour y revient de fait à randomiser le signe de parcours ϵ .

On remarque aussi que, à partir du moment où on utilise le critère de Metropolis, les seules propriétés de T_ϵ sollicitées sont la symétrie et la conservation des volumes. Donc en principe, n'importe quel schéma symétrique symplectique pourrait être utilisé à la place de T_ϵ . On a cependant évidemment intérêt à suivre au plus près possible le flot Hamiltonien, pour limiter le taux de rejet.

Le contexte standard d'application de l'algorithme est donné par :

$$E(y) = \frac{1}{2} \|y\|^2$$

ce qui correspond à attribuer à y une loi gaussienne à composantes indépendantes. Dans l'interprétation mécanique, $E(y)$ est une énergie cinétique, pour des masses unité. Il sera commode par la suite de prendre des masses différentes selon les composantes de y pour équilibrer leur impact sur la dynamique. La seconde équation de mouvement, $\frac{d}{dt}y = -\nabla U$ est la loi de Newton, dans un champ de force dérivant du potentiel U . L'algorithme stochastique consiste à alterner des simulations de y avec des trajectoires hamiltoniennes. L'introduction de y est intéressante dans la mesure où la simulation directe de $K \exp -U(x)$ est bien plus complexe que celle de y .

3.1. Convergence de l'algorithme. L'étude de la convergence dans le cas général est complexe. Ici, seule la convergence dans le cas de lois gaussiennes, et donc de potentiel de la forme

$$U(x) = \frac{1}{2} (x - \mu)^t \Sigma^{-1} (x - \mu)$$

est examinée. C'est un peu trivial, car l'algorithme lui même ne présente pas d'intérêt dans ce contexte, mais vérifier cette convergence est néanmoins utile, et peut

être instructif. En outre, seule la version comportant un pas de schéma leap-frog associé à un échantillonneur indépendant est considérée. Pour cette version :

$$\begin{aligned} Y^* &= \eta_n - \frac{\epsilon}{2} \Sigma^{-1} (X_n - \mu) \\ X_{n+1} &= X_n + \epsilon Y^* \end{aligned}$$

avec $\eta_n \sim \mathcal{N}[0, I]$ indépendant des valeurs précédentes. Cela se résume à :

$$X_{n+1} - \mu = \left(I - \frac{\epsilon^2}{2} \Sigma^{-1}\right) (X_n - \mu) + \epsilon \eta_n$$

On reconnaît la discrétisation de l'équation de Langevin avec un schéma d'Euler explicite. Si la valeur initiale est gaussienne, tous les itérés le restent, et on peut se limiter à examiner les moments d'ordre un et deux. Les espérances suivent :

$$\mu_{n+1} - \mu = \left(I - \frac{\epsilon^2}{2} \Sigma^{-1}\right) (\mu_n - \mu)$$

La matrice d'itération $A = I - \frac{\epsilon^2}{2} \Sigma^{-1}$, a un rayon spectral $\rho(A) < 1$ pour $\epsilon > 0$ pas trop grand, ce qui suffit à assurer que $\mu_n - \mu \rightarrow 0$. Pour les covariances, on a :

$$\begin{aligned} \Sigma_{n+1} &= A \Sigma_n A + \epsilon^2 I \\ &= A^{n+1} \Sigma_0 A^{n+1} + \epsilon^2 (I + A^2 + \dots + A^{2n}) \end{aligned}$$

dont la limite est :

$$\Sigma_\infty = \epsilon^2 (I - A^2)^{-1}$$

Mais :

$$(I - A^2)^{-1} = \left(\epsilon^2 \Sigma^{-1} - \frac{\epsilon^4}{4} \Sigma^{-2}\right)^{-1} = \epsilon^{-2} \Sigma \left(I - \frac{\epsilon^2}{4} \Sigma^{-1}\right)^{-1}$$

et :

$$\Sigma_\infty = \Sigma \left(I - \frac{\epsilon^2}{4} \Sigma^{-1}\right)^{-1}$$

Où il apparaît que la covariance limite est faiblement biaisée, sauf si nous utilisons un pas décroissant $\epsilon_n \rightarrow 0$. Le fait d'utiliser un critère de Metropolis corrige néanmoins cette situation.

4. AUTRES SCHÉMAS DE DISCRÉTISATION

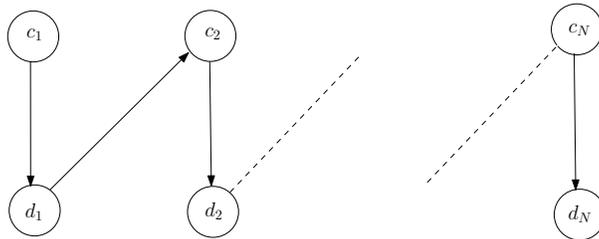
D'après ce qui vient d'être vu, les propriétés souhaitables des intégrateurs numériques de trajectoires hamiltoniennes sont :

- Réversibilité : si $y = T_\epsilon x$ alors $x = T_{-\epsilon} y$
- conservation des volumes (intégrateur symplectique).

Le schéma leap-frog a ces deux propriétés, mais n'est que d'ordre deux. Il existe des schémas symplectiques d'ordre supérieur, qui pour l'hamiltonien séparable (canonique) qui nous intéresse, s'écrivent sous la forme de composition de pas explicites. Partant de $x_n^0 = x_n$ et de $y_n^0 = y_n$, ces schémas sont donnés par :

$$\begin{aligned} x_n^k &= x_n^{k-1} + \epsilon c_k \nabla E(y_n^{k-1}) \\ y_n^k &= y_n^{k-1} - \epsilon d_k \nabla U(x_n^k) \end{aligned}$$

puis $x_{n+1} = x_n^N$ et $y_{n+1} = y_n^N$. L'argument donné plus haut pour montrer la conservation des volumes de leap-frog s'applique encore ici. D'après l'ordre d'entrée en jeu des coefficients (figure 4.1), la réversibilité demande seulement :

FIG. 4.1. *Séquence d'utilisation des coefficients pour un intégrateur.*TAB. 1. *Coefficients d'un schéma symplectique d'ordre 6 réversible*

$c_1 = c_8$	0.39225680523878
$c_2 = c_7$	0.510043411918458
$c_3 = c_6$	-0.471053385409758
$c_4 = c_5$	0.0687531682525198
$d_1 = d_7$	0.78451361047756
$d_2 = d_6$	0.235573213359357
$d_3 = d_5$	-1.17767998417887
d_4	1.31518632068391

$$c_i = c_{N-i+1}$$

$$d_N = 0$$

$$d_i = d_{N-i}$$

pour $i = 1, \dots, N$. Le schéma leap-frog, par exemple est défini par $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$, $d_1 = 1$ et $d_2 = 0$, et vérifie bien ces conditions. On peut aussi évidemment échanger les rôles de x et y dans ces itérations, de telle sorte qu'il y a en réalité deux applications possibles. J'ai trouvé dans la littérature plusieurs schémas symplectiques d'ordre 3, qui ne sont pas réversibles (les schémas réversibles sont nécessairement d'ordre pair). On trouve aussi un schéma d'ordre quatre :

$$\beta = (1/2)^3$$

$$c_1 = c_4 = 1/(2(2 - \beta))$$

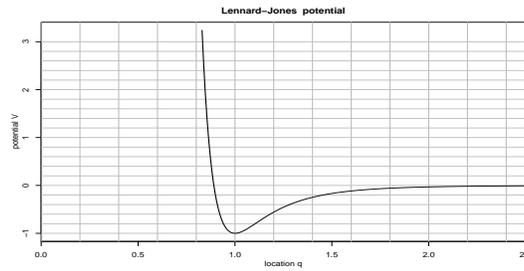
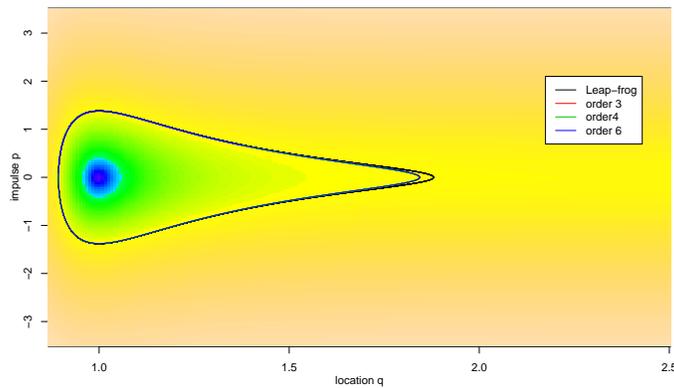
$$c_2 = c_3 = (1 - \beta)/(2(2 - \beta))$$

$$d_1 = d_3 = 1/(2 - \beta)$$

$$d_2 = -\beta/(2 - \beta)$$

(et $d_4 = 0$), qui est réversible, et une schéma d'ordre six, également réversible, comportant $N = 8$ pas élémentaires, dont les coefficients sont donnés par le tableau (1).

Ces différents intégrateurs ont été comparés sur un problème jouet, à une dimension d'espace, et potentiel de Lennard-Jones $U(x) = 1/x^{12} - 2/x^6$. Le graphe de ce potentiel est donné par la figure (4.2). Il s'agit d'un potentiel très utilisé dans les modèles de dynamique moléculaire, conduisant à des forces fortement répulsives à courte distance (ce qui traduit l'encombrement des atomes) et faiblement attractives à distance un peu plus élevée, avant de disparaître progressivement. La présence de singularité à l'origine en fait un bon modèle test.

FIG. 4.2. *Graphe du potentiel de Lennard-Jones $U(x) = \frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6}$.*FIG. 4.3. *Hamiltonien dans le cas du potentiel Lennard-Jones, et trajectoires simulées par les 4 intégrateurs testés.*

La figure (4.3) montre le potentiel hamiltonien, ainsi que les trajectoires simulées par les 4 intégrateurs, en partant du même point initial, et en utilisant le même nombre de pas élémentaires (compte pour pas élémentaire chaque modification de la position ou de l'impulsion). On en compte par exemple 3 pour leap-frog. On compare donc à effort de calcul identique). On a simulé 8400 pas élémentaires avec $\epsilon = 0.01$ pour chaque méthode, ce qui génère plusieurs périodes.

La plus ou moins bonne conservation de l'hamiltonien est montrée dans les deux figures (4.4). Le schéma d'ordre 4 donne des résultats plutôt décevants par rapport à celui d'ordre 3, mais comme ce dernier n'est pas symétrique, il n'est malheureusement pas utilisable. Par contre, le schéma d'ordre 6 est excellent, et le passage près de la singularité n'est pas décelable à cette échelle.

5. EXPERIMENTATION PRÉLIMINAIRE DU SIMULATEUR STOCHASTIQUE.

La simulation d'une variable aléatoire scalaire présente l'avantage de pouvoir être suivie visuellement, on commence donc par une simulation 1D. Le potentiel Lennard-Jones tendant vers 0 aux grandes distances, il ne conduit pas à une distribution intégrable. En ajoutant un terme linéaire, ce comportement est corrigé, et on a une distribution donnée par :

$$f(x) = K \exp(-1/x^{12} + 2/x^6 - x)$$

FIG. 4.4. *Qualité de la conservation de l'hamiltonien par les 4 intégrateurs. Dans la première figure, l'abscisse est le nombre de pas élémentaires, et dans la seconde la position.*

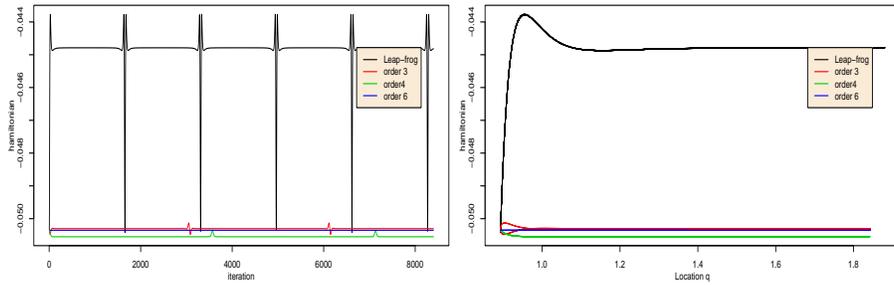
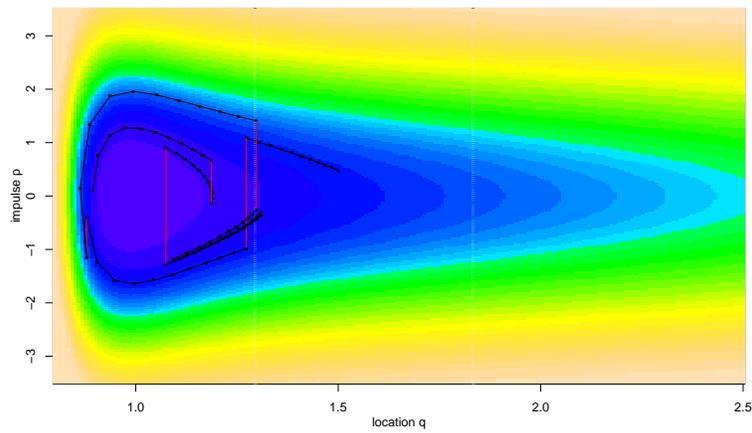


FIG. 5.1. *Quelques pas du simulateur hamiltonien, pour un potentiel de type Lennard-Jones, avec terme linéaire ajouté.*

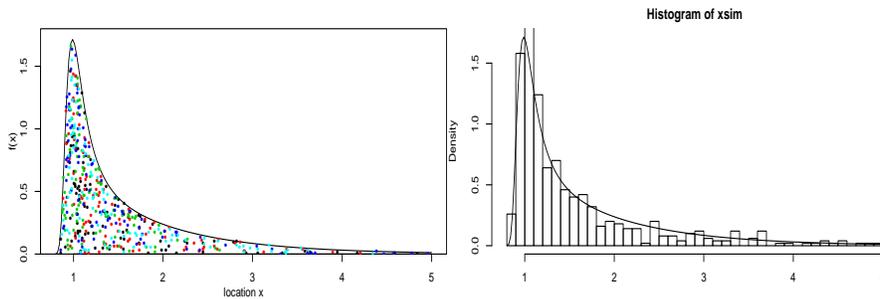


Cette distribution conserve le caractère fortement répulsif aux courtes distances du potentiel initial.

La figure (5.1) montre 8 pas stochastiques de l'application de l'algorithme, avec randomisation du sens de parcours. Les parties noires sont les trajectoires hamiltoniennes, dans lesquelles on a fait figurer la discrétisation (10 pas utilisant le schéma d'ordre 6, avec $\epsilon = 0.03$), et les sauts stochastiques sont figurés par les lignes verticales rouges (avec un échantillonneur aléatoire pur). On remarque que la vitesse de parcours est grandement accélérée dans la partie la plus abrupte des trajectoires. La précision du schéma fait que les transitions sont presque toujours acceptées. Ce genre de figure peut être d'une aide précieuse pour choisir les paramètres de l'algorithme.

Pour vérifier que l'on obtient bien une simulation de la distribution cible, on a simulé 500 points, lesquels sont obtenus en conservant un point sur 8 dans une trajectoire de 500×8 pas stochastiques. Chaque pas est constitué d'un tirage gaussien, suivi de 10 pas discrets, puis d'un test de metropolis. Ces points sont utilisés ensuite dans la figure comme abscisse x_i auxquels on associe les ordonnées $y_i = U_i f(x_i)$

FIG. 5.2. *Echantillon de 500 points pris dans une trajectoire hamiltonienne stochastique (voir texte. Les couleurs permettent un suivi : on a 100 points noirs, suivis de 100 rouges, puis verts, bleus foncés, et bleus clairs).*



dans lesquelles les U_i sont des variables uniformes indépendantes. On doit obtenir ainsi un semis de points poissonien de densité uniforme dans le sous-graphes de f si la simulation est correcte. La figure (5.2) montre que tel semble bien être le cas. L’histogramme empirique donne une autre image de cela.

6. APPLICATION RIC1

Le problème de la simulation conditionnelle des impédances et de la température intérieure d’un modèle de bâtiment, avec un régulateur de type proportionnel, mais avec saturation est abordé ici. Sont considérés comme connus la température de consigne ainsi que la température extérieure, le chauffage, le gain du régulateur ainsi que la puissance maximale de l’installation. La puissance effective résulte dans le modèle adopté d’un double seuillage de la puissance demandée par le régulateur, avec un lissage par convolution. Le premier seuil traduit la contrainte de positivité, le second est imposé par la puissance de l’installation. Concrètement, la fonction de saturation adoptée est la convoluée d’une fonction rampe avec une densité gaussienne de faible variance, cette convolution assurant la différenciabilité. Elle est de la forme :

$$Q_{ch} = \phi(K(\theta_n^c - \theta_n^i))$$

avec

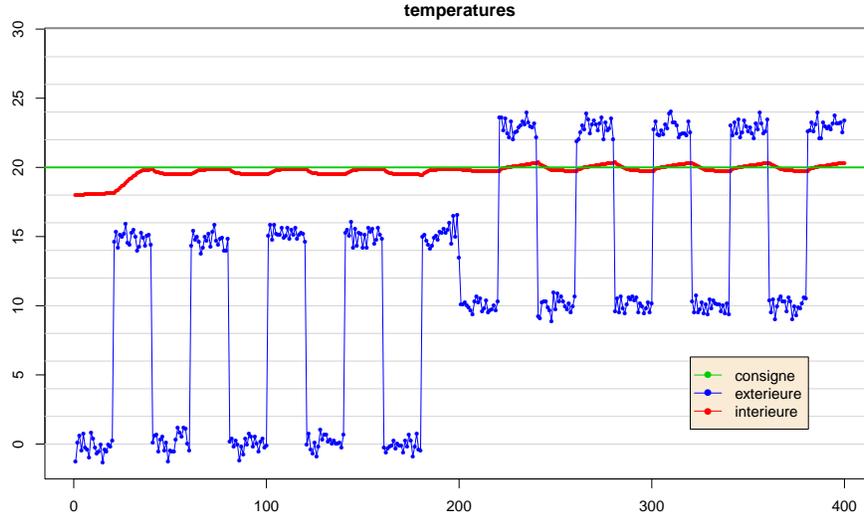
$$\phi(x) = \int h(u) g(x - u; \sigma^2) du$$

ou h est la fonction linéaire saturée en 0 et en W^M :

$$h(x) = (W^M \wedge x)_+$$

La fonction réponse ϕ est supposée une donnée du problème, ce qui revient ici à se donner, outre la puissance maximale, la variance de la gaussienne. L’évaluation explicite de h ainsi que de sa dérivée, en un point x font intervenir la fonction de répartition de la loi de Gauss, qui est disponible sous R . Dans l’expérience décrite ici, on s’est donné $W^M = 5$ (kw) et un écart-type de $\sigma = 0.1$ pour le noyau gaussien, ce qui entraîne un effet de lissage très faible. On a dans ce cas explicitement, si G

FIG. 6.1. *Températures dans la simulation de référence. La température extérieure est périodique (avec deux phases et une transition brutale), et saisonnalisée (deux saisons de 5 cycles). La consigne est maintenue constante à 20 degrés.*



est la fonction de répartition de la loi de Gauss :

$$\phi(u) = (W^M - u) G\left(\frac{u - W^M}{\sigma}\right) + u G\left(\frac{u}{\sigma}\right) + \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{u^2}{\sigma^2}\right) - \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{u - W^M}{\sigma}\right)^2\right) \right\}$$

et :

$$\phi'(u) = G\left(\frac{u}{\sigma}\right) - G\left(\frac{u - W^M}{\sigma}\right)$$

La température extérieure imposée dans la génération des données est périodique et saisonnalisée (figure 6.1). Les valeurs de température conduisent à observer les deux formes de non-linéarités dans la puissance, avec saturation à W^M et hiver et non-linéarité due à la positivité en cours de journée par dépassement de température de consigne en demi-saison (figure 6.2). La série générée comporte 400 valeurs temporelles pour cet essai.

Les paramètres à inférer sont l'inverse de la résistance, notée R_i , l'inverse de la capacité C_i , et aussi la série des 400 valeurs de température intérieure. On adopte un modèle à temps discret, et un schéma d'ordre un pour la dérivée de la température. Les flux dans les deux branches sont au pas n donnés par :

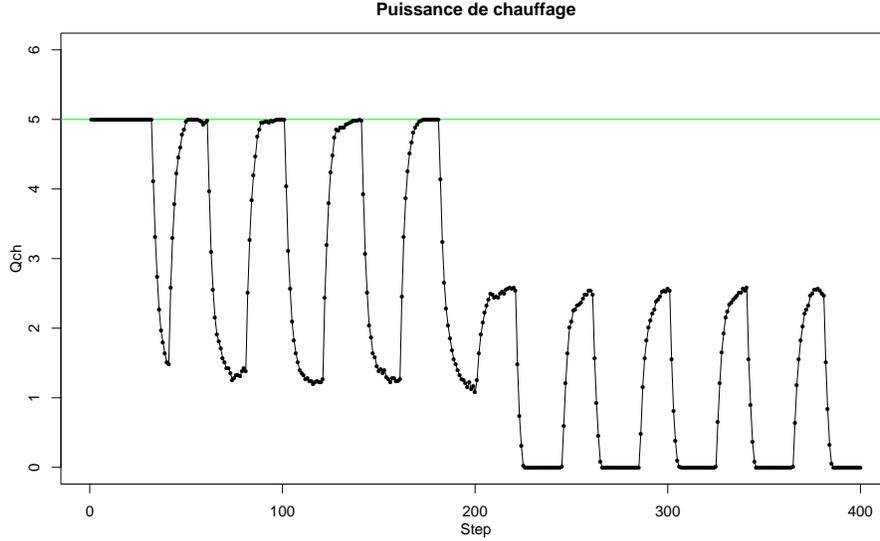
$$W_n^r = R_i (\theta_n^i - \theta_n^e)$$

pour la branche résistive, et :

$$W_n^c = C_i (\theta_{n+1}^i - \theta_n^i)$$

pour la branche capacitive (pas temporel unité). La condition de bouclage est assurée par l'équilibre des flux $Q_{ch} = W_n^r + W_n^c$, ce qui permet le calcul de θ_{n+1}^i à partir de toutes les valeurs en n . Le système linéarisé est stable si $K + R_i < 2C_i$.

FIG. 6.2. *Puissance de chauffage. On observe saturation en saison froide, et coupure à zéro en milieu de journée lors de la saison plus chaude.*



Pour mémoire, la discrétisation d'ordre supérieur :

$$W_n^c = \frac{1}{2} C_i (\theta_{n+1}^i - \theta_{n-1}^i)$$

conduit à des instabilités. L'écart à la consigne $D_n = \theta_n^i - \theta^c$ suit, pour un tel modèle :

$$D_{n+1} = D_{n-1} - \frac{2}{C_i} (K + R_i) D_n + 2 \frac{R_i}{C_i} (\theta_n^e - \theta^c)$$

soit :

$$\begin{pmatrix} D_{n+1} \\ D_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2(K + R_i)/C_i & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_n \\ D_{n-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2(\theta_n^e - \theta^c)R_i/C_i \\ 0 \end{pmatrix}$$

La matrice d'itération a les valeurs propres $\lambda = -\rho \pm \sqrt{(1 + \rho^2)}$, avec $\rho = (K + R_i)/C_i$. Elle a donc toujours une valeur propre $\lambda < -1$, et la composante associée va donc diverger.

Les données de référence ont donc été générées d'après le premier modèle, en ajoutant un bruit stochastique à chaque terme, selon :

$$\begin{aligned} \theta_{n+1}^i &= \theta_n^i - \frac{R_i}{C_i} (\theta_n^i - \theta_n^e) + \frac{1}{C_i} Q_{ch}(n) + \epsilon_{n+1} \\ Q_{ch}(n+1) &= \phi[K(\theta^c - \theta_{n+1}^i)] + \eta_{n+1} \end{aligned}$$

Ici, η_{n+1} est à interpréter comme traduisant des apports caloriques non comptabilisés par l'instrumentation, et inconnus (mais de moyenne nulle : les apports internes sont supposés compensés par des pertes intermittentes). La dichotomie entre η et ϵ est liée au fait que Q_{ch} est supposé observé. Si dans la première équation, Q_{ch} était remplacé par $\phi(K(\theta^c - \theta^i))$ le bruit η serait véritablement un bruit d'observation, mais on perdrait en stabilité dans l'inversion.

Pour l'inversion, les potentiels suivants ont été utilisés :

$$V_1 = \frac{1}{2\sigma_{\text{prop}}^2} \sum_n \{Q_{ch} - R_i(\theta_n^i - \theta_n^e) - C_i(\theta_{n+1}^i - \theta_n^i)\}^2$$

On remarque que par rapport au modèle utilisé en simulation directe, ce potentiel attribue à ϵ une variance proportionnelle à C_i^2 . Le second potentiel est lié à l'équation d'observation :

$$V_2 = \frac{1}{2\sigma_{\text{obs}}^2} \sum_n \{Q_{ch}(n) - \phi(K(\theta_n^c - \theta_n^i))\}^2$$

Les potentiels suivants proviennent du prior. Pour la température, il est naturel de supposer une température de confort, autour de laquelle les faibles écarts seront peu pénalisés, mais par contre une augmentation rapide de la pénalisation pour les valeurs importantes de l'écart. Le potentiel suivant a été utilisé :

$$V_3 = \kappa \sum (\theta_n^i - 20)^4$$

Selon la valeur de κ , ce terme peut être plus ou moins contraignant. On a pris une valeur unité ici. Les potentiels pour R_i et C_i sont quadratiques, ce qui correspond à des priors gaussiens, de paramètres respectivement $\mu_{R_i} = 0.5$ et $\sigma_{R_i} = 0.5$ d'une part, et $\mu_{C_i} = 25$ avec $\sigma_{C_i} = 10$ pour l'inverse de la capacité. Ces valeurs sont assez proches des valeurs de référence pour les moyennes, mais les écart-types du même ordre que les moyennes rendent ces distributions peu informatives de fait.

Il reste à fixer les paramètres de l'algorithme. Cela comprend les variances des termes d'erreur σ_{prop}^2 et σ_{obs}^2 , qui peuvent différer des variances génératives, d'une part parce que les modèles diffèrent, et d'autre part parce que l'on peut envisager un schéma de recuit simulé pour contraindre progressivement les valeurs de Q_{ch} . Ici on a pas utilisé un tel schéma, et on s'est limité à $\sigma_{\text{prop}}^2 = 1$ et $\sigma_{\text{obs}}^2 = 0.5$, mais il pourra être utile de le faire par la suite.

Un second type de paramètres de l'algorithme concerne les variances des impulsions. Ces variances conditionnent les vitesses de l'algorithme : la dispersion des valeurs d'impulsion est proportionnelle aux écart-types, mais le gradient du potentiel est en $1/\sigma^2$. Au total, augmenter l'écart-type revient à réduire le pas. Un autre effet de ces variances est de permettre d'équilibrer les différents paramètres. A un paramètre ayant une forte influence, on associera une faible vitesse, et donc un écart-type élevé. Ici, les valeurs $\sigma_{*\theta}^2 = 0.5$ et $\sigma_{*C_i}^2 = \sigma_{*R_i}^2 = 10$ ont été utilisées, pour compenser le déséquilibre entre l'effet d'une perturbation de conductance, qui affecte toutes les données, et celui d'une seule valeur de température.

Devant la difficulté à choisir le pas de l'intégrateur, on a utilisé un schéma adaptatif basé sur le taux d'acceptation dans le test de Metropolis sur les quatre itérations antérieures (ce qui gagnerait probablement à être augmenté). Un taux de rejet supérieur à 50% traduit une perte de précision de l'intégrateur, et il a été choisi de diviser le pas par 2 lorsque cela est observé. A l'inverse, un taux de 100% indique que l'on peut augmenter ce pas (d'un facteur de 1.2 ici, par prudence). En outre, pour avoir une sécurité supplémentaire, le pas a été plafonné à 0.01.

Un nombre fixe de 2000 itérations, comportant chacune 5 pas hamiltoniens, sans test d'arrêt, et partant d'une simulation de valeurs indépendantes de moyenne 18 et variance 0.5 pour la température, et conforme au prior pour les conductances, a été simulé. Les résultats, après 1000 et 2000 itérations, en ce qui concerne le chauffage (reconstitué à partir des températures intérieures simulées) sont montrés en figure

FIG. 6.3. *Chauffage reconstruit à partir des températures intérieures simulées. Les valeurs de référence sont en noir, et les valeurs initiales en vert. La température initiale étant proche de 18 degrés, on est en butée sur toute la durée simulée. Les courbes bleue et rouge montrent une estimation satisfaisante des consignes. Il serait probablement possible d'améliorer le suivi de Q_{ch} en adoptant une stratégie de recuit simulé, ce qui n'a pas été fait ici.*

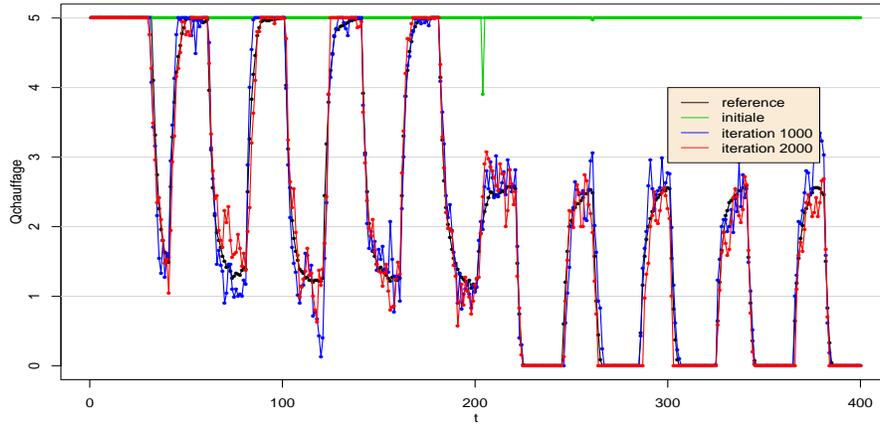
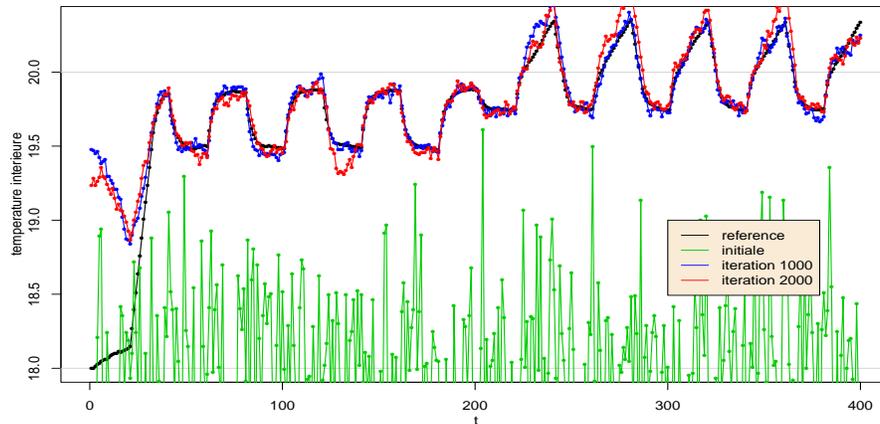


FIG. 6.4. *Température intérieure de référence, simulation initiale, puis simulations après 1000 et 2000 pas de l'algorithme.*



(6.3). La reconstitution des températures intérieures est illustrée en figure (6.4). La série initiale est rapidement oubliée, et on obtient vite une simulation conditionnelle satisfaisante sur les deux saisons. Seule la phase initiale (montée de 18 à 19.8 degrés pendant les 30 premiers pas approximativement) est difficilement reconstruite.

La convergence semble très rapide si nous nous limitons à examiner les températures, et puissances, puisque les résultats à 2000 itérations ne montrent pas de

FIG. 6.5. *Estimation de l'inverse de la résistance. La convergence est obtenue très rapidement, et avec un précision inattendue. les lignes bleues montrent la distribution a-priori : moyenne en trait plein, et intervalle à 95% et tiretés.*

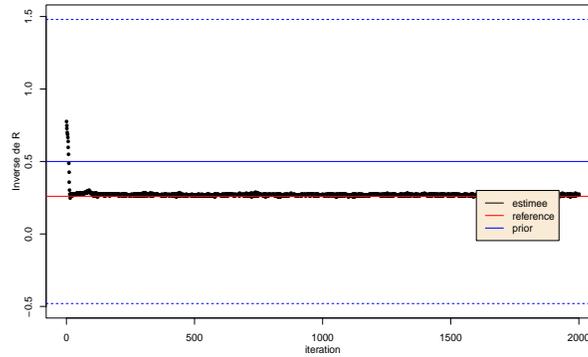
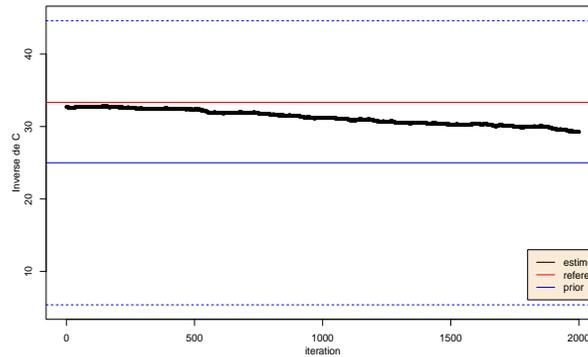


FIG. 6.6. *Estimation de l'inverse de la capacité. A l'inverse de l'estimation de résistance, la capacité ne montre pas de convergence, sans que l'on puisse décider s'il s'agit de propriété de la distribution a-posteriori (manque d'informativité du chauffage) ou de l'algorithme. D'autres essais seront nécessaires pour éclaircir ce point.*



différence marquée par rapport à ceux à 1000. Les valeurs estimées des conductances (figure (6.5) pour l'inverse de la résistance, et (6.6) pour la capacité inverse) montrent que si tel est bien le cas pour la résistance, on a pas stabilisation pour la capacité.

CONCLUSIONS

Les premiers essais de simulation hamiltonienne avec intégrateur symplectique symétrique d'ordre 6 sont certainement encourageants. Ils permettent de traiter de manière effective la non-linéarité due à la saturation. En outre, ils donnent une grande liberté dans le choix des priors, puisqu'il suffit que les potentiels associés

soient différentiables. Ainsi, des dissymétries, des valeurs interdites, etc peuvent être introduites.

Un avantage de cette méthode est son parallélisme : toutes les composantes sont mises à jour simultanément, en exploitant les lignes de plus grande pente de la vraisemblance. Cet avantage pourrait cependant être un inconvénient dans certains cas (grandes dimensions, et fort contraste de dynamique). On a vu que les variances des impulsions permettaient d'ajuster les influences des paramètres. Il existe une autre possibilité par partitionnement des inconnues. Si le vecteur d'état est partitionné selon $X = (X_1, X_2)$ et de même l'impulsion selon $Y = (Y_1, Y_2)$, l'hamiltonien partiel :

$$H(X_1, Y_1 | X_2, Y_2)$$

obtenu en fixant simplement X_2 et Y_2 dans l'hamiltonien complet, est associé à la loi de Gibbs conditionnelle $f(X_1, Y_1 | X_2, Y_2)$. Autrement dit, nous pouvons partitionner en blocs les inconnues, et alterner les itérations sur chaque bloc, à la manière de l'échantillonneur de Gibbs. On a donc ainsi un algorithme hybride, intermédiaire entre un schéma complètement parallèle, et un schéma série (une composante par itération), qui pourrait nous aider à résoudre des situations dans lesquelles en raison d'un contraste trop grand d'échelle on devrait choisir un pas exagérément petit.

Les perspectives sont donc intéressantes, mais demandent évidemment à être confirmées lors d'applications à des modèles plus complexes, et de dimension plus élevée.