

# Estimation non-paramétrique pour des diffusions cinétiques hypoelliptiques partiellement observées

**Clémentine PRIEUR<sup>a</sup>**

en collaboration avec

Patrick CATTIAUX<sup>b</sup> et Jose R. LEÓN<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Université Joseph Fourier (Grenoble)

<sup>b</sup>Université Paul Sabatier (Toulouse)

<sup>c</sup> Université Centrale de Caracas (Venezuela)

# Plan de l'exposé

- 1 Introduction
- 2 Problème d'estimation
- 3 Propriétés probabilistes du modèle
- 4 Résultats d'estimation, schéma de démonstration
- 5 Etude numérique

# Plan de l'exposé

- 1 Introduction
- 2 Problème d'estimation
- 3 Propriétés probabilistes du modèle
- 4 Résultats d'estimation, schéma de démonstration
- 5 Etude numérique

# Modèle

On considère un système hamiltonien amorti, perturbé par un bruit blanc:  
( $Z_t := (X_t, Y_t) \in \mathbb{R}^{2d}$ ,  $t \geq 0$ ) régi par

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt \\ dY_t = \Sigma(X_t, Y_t) dW_t - (c(X_t, Y_t) Y_t + \nabla V(X_t)) dt \end{cases}$$

où  $W$  désigne un mouvement brownien standard.

# Exemples

## Particule en communication avec un réservoir:

On considère une particule dans un potentiel  $V$ . Sa dynamique est déterminée par le Hamiltonien  $H(p, q) = \frac{1}{2} p^2 + V(q)$ :  $\dot{q} = \partial_p H$ ,  $\dot{p} = -\partial_q H$ .

Cette particule est en contact avec un réservoir de chaleur à température  $T > 0$ , modélisé par un processus d'Ornstein-Uhlenbeck agissant comme un bruit sur le moment  $p$ :

$$\begin{aligned}dq_t &= p_t dt \\ dp_t &= (-\gamma p_t - \nabla V(q_t))dt + \sqrt{2\gamma T} dB_t.\end{aligned}$$

# Exemples

## Particule en communication avec un réservoir:

On considère une particule dans un potentiel  $V$ . Sa dynamique est déterminée par le Hamiltonien  $H(p, q) = \frac{1}{2} p^2 + V(q)$ :  $\dot{q} = \partial_p H$ ,  
 $\dot{p} = -\partial_q H$ .

Cette particule est en contact avec un réservoir de chaleur à température  $T > 0$ , modélisé par un processus d'Ornstein-Uhlenbeck agissant comme un bruit sur le moment  $p$ :

$$\begin{aligned}dq_t &= p_t dt \\ dp_t &= (-\gamma p_t - \nabla V(q_t))dt + \sqrt{2\gamma T} dB_t.\end{aligned}$$

# Exemples

## Chaîne d'oscillateurs en communication avec deux réservoirs à des températures différentes:

La dynamique est déterminée par le Hamiltonien

$$H(p, q) = \sum_{1 \leq i \leq d} \frac{p_i^2}{2} + V(q)$$

avec  $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  de la forme

$$\sum_{1 \leq i \leq d} U^{(1)}(q_i) + \sum_{1 \leq i \leq d-1} U^{(2)}(q_i - q_{i+1}).$$

$U^{(1)}$  potentiel de piégeage,  $U^{(2)}$  potentiel d'interaction.

# Exemples

Les réservoirs de chaleur  $T_1$  et  $T_d$  agissent sur les moments des particules 1 et  $d$  comme des processus d'Ornstein-Uhlenbeck:

$$dq_j(t) = p_j(t)dt \quad 1 \leq j \leq d$$

$$dp_1(t) = (-\gamma p_1(t) - \partial_{q_1} V(q_t))dt + \sqrt{2\gamma T_1} dB_1(t)$$

$$dp_j(t) = (-\partial_{q_j} V(q_t))dt \quad 2 \leq j \leq d-1$$

$$dp_d(t) = (-\gamma p_d(t) - \partial_{q_d} V(q_t))dt + \sqrt{2\gamma T_d} dB_d(t).$$

Sous forme condensée:

$$\begin{cases} dq(t) = p(t)dt \\ dp(t) = (-\gamma \Lambda p(t) - \nabla_q V(q(t)))dt + \sqrt{2\gamma T} dB(t) \end{cases}$$

avec  $\Lambda : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^2$  la projection  $\Lambda(x_1, \dots, x_d) = (x_1, x_d)$ ,

$\sqrt{T} : (x_1, x_d) \rightarrow (\sqrt{T_1}x_1, \sqrt{T_d}x_d)$  et  $B(t) = (B_1(t), B_d(t))$  un MB de  $\mathbb{R}^2$ .

## Exemples

Les réservoirs de chaleur  $T_1$  et  $T_d$  agissent sur les moments des particules 1 et  $d$  comme des processus d'Ornstein-Uhlenbeck:

$$dq_j(t) = p_j(t)dt \quad 1 \leq j \leq d$$

$$dp_1(t) = (-\gamma p_1(t) - \partial_{q_1} V(q_t))dt + \sqrt{2\gamma T_1} dB_1(t)$$

$$dp_j(t) = (-\partial_{q_j} V(q_t))dt \quad 2 \leq j \leq d-1$$

$$dp_d(t) = (-\gamma p_d(t) - \partial_{q_d} V(q_t))dt + \sqrt{2\gamma T_d} dB_d(t).$$

Sous forme condensée:

$$\begin{cases} dq(t) = p(t)dt \\ dp(t) = (-\gamma \Lambda p(t) - \nabla_q V(q(t)))dt + \sqrt{2\gamma T} dB(t) \end{cases}$$

avec  $\Lambda : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^2$  la projection  $\Lambda(x_1, \dots, x_d) = (x_1, x_d)$ ,

$\sqrt{T} : (x_1, x_d) \rightarrow (\sqrt{T_1}x_1, \sqrt{T_d}x_d)$  et  $B(t) = (B_1(t), B_d(t))$  un MB de  $\mathbb{R}^2$ .

# Equation de Fokker-Planck cinétique

On considère une particule dans  $\mathbb{R}^d$ , dont le mouvement est régi par les équations de Newton avec une force provenant d'un potentiel  $-\nabla V$ , un terme de forçage aléatoire type bruit blanc, un terme de friction de coefficient  $\theta$ : alors sa position  $X_t$ , au temps  $t$ , vérifie l'EDS du second ordre

$$\frac{d^2 X_t}{dt^2} = -\nabla V(X_t) + \sqrt{2} \frac{dW_t}{dt} - \frac{dX_t}{dt},$$

où  $W_t$  désigne un mouvement brownien standard.

On définit l'EDP associée de la façon suivante: si  $f_t(x, v)$  est la densité de probabilité de  $(X_t, \dot{X}_t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ , alors  $f$  est solution de:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla_x f - \nabla V(x) \cdot \nabla_v f = \Delta_v f + \nabla_v \cdot (fv). \quad (1.1)$$

L'équation (1.1) qui fait apparaître la position mais également la vitesse de la particule est appelée **équation cinétique**.

# Equation de Fokker-Planck cinétique

L'équation (1.1) est une équation fondamentale, notamment en cinétique des gaz. Il existe des variantes non linéaires comme l'équation de Fokker-Planck Vlasov (plasmas, astrophysique, à de très grandes échelles de temps), ...

**Hypocoercivité:** dans (1.1)

- le terme de gauche est conservatif, il décrit la trajectoire d'un système classique dans  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  avec hamiltonien  $V(x) + |v|^2/2$ ,
- le terme de droite est un terme de diffusion dégénéré (il n'agit que sur la variable de vitesse  $v$ ).

Pour un potentiel quadratique on a un unique état d'équilibre global, explicite et gaussien. Il faut considérer la combinaison de  $x$  et de  $v$  pour avoir une convergence exponentielle vers l'équilibre.

# Equation de Fokker-Planck cinétique

L'équation (1.1) est une équation fondamentale, notamment en cinétique des gaz. Il existe des variantes non linéaires comme l'équation de Fokker-Planck Vlasov (plasmas, astrophysique, à de très grandes échelles de temps), ...

**Hypocoercivité:** dans (1.1)

- le terme de gauche est conservatif, il décrit la trajectoire d'un système classique dans  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  avec hamiltonien  $V(x) + |v|^2/2$ ,
- le terme de droite est un terme de diffusion dégénéré (il n'agit que sur la variable de vitesse  $v$ ).

Pour un potentiel quadratique on a un unique état d'équilibre global, explicite et gaussien. Il faut considérer la combinaison de  $x$  et de  $v$  pour avoir une convergence exponentielle vers l'équilibre.

# Equation de Fokker-Planck cinétique

L'équation (1.1) est une équation fondamentale, notamment en cinétique des gaz. Il existe des variantes non linéaires comme l'équation de Fokker-Planck Vlasov (plasmas, astrophysique, à de très grandes échelles de temps), ...

**Hypocoercivité:** dans (1.1)

- le terme de gauche est conservatif, il décrit la trajectoire d'un système classique dans  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  avec hamiltonien  $V(x) + |v|^2/2$ ,
- le terme de droite est un terme de diffusion dégénéré (il n'agit que sur la variable de vitesse  $v$ ).

Pour un potentiel quadratique on a un unique état d'équilibre global, explicite et gaussien. Il faut considérer la combinaison de  $x$  et de  $v$  pour avoir une convergence exponentielle vers l'équilibre.

# Hypoconvexité

Pour un potentiel  $V$  plus général, on a encore un équilibre global de la forme suivante:

$$f_{\infty}(x, v) = \frac{e^{V(x) + \frac{|v|^2}{2}}}{c_{\infty}},$$

où  $c_{\infty}$  est une constante de normalisation.

## Questions:

- est-ce qu'on a convergence vers l'équilibre?
- à quelle vitesse?

Si on se place dans un cas d'ergodicité avec convergence exponentielle vers l'équilibre, est-il possible d'estimer la densité de probabilité stationnaire?

# Objectifs

Soit  $(Z_t := (X_t, Y_t) \in \mathbb{R}^{2d}, t \geq 0)$  gouverné par le système:

$$\begin{cases} dX_t &= Y_t dt \\ dY_t &= \sigma dW_t - (c(X_t, Y_t)Y_t + \nabla V(X_t)) dt \end{cases}$$

où la fonction  $c$  est appelée force d'amortissement,  $V$  le potentiel,  $\sigma$  est une constante strictement positive et  $W$  est un mouvement brownien standard.

hypothèses:

- pour tout état initial  $z = (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}$ , existence et unicité d'une solution faible non explosive,
- ergodicité du processus.

On suppose également:

- que la convergence dans le théorème ergodique est "assez rapide",
- que l'unique probabilité invariante  $\mu$  admet une densité  $p_s$  par rapport à Lebesgue.

# Plan de l'exposé

- 1 Introduction
- 2 Problème d'estimation**
- 3 Propriétés probabilistes du modèle
- 4 Résultats d'estimation, schéma de démonstration
- 5 Etude numérique

# Objectifs

On souhaite estimer la densité invariante  $p_s : (x, y) \in \mathbb{R}^{2d} \rightarrow p_s(x, y)$ .

**Cadre d'observations partielles:**

on suppose de plus qu'on ne dispose que d'observations partielles (incomplètes): on ne dispose pas des observations de la vitesse  $y_t$ .

*Estimateur à noyau*

$$\hat{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{k=1}^n K \left( \frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - \frac{X_{i+1}h_n - X_{ih_n}}{h_n}}{b_{2,n}} \right).$$

# Plan de l'exposé

- 1 Introduction
- 2 Problème d'estimation
- 3 Propriétés probabilistes du modèle**
- 4 Résultats d'estimation, schéma de démonstration
- 5 Etude numérique

## Comportement en temps long, coercivité et mélange

Wu (2000), Bakry, Cattiaux & Guillin (2008), Villani (2009)

### Hypothèses $\mathcal{H}_1$

- (i) le potentiel  $V$  est borné inférieurement,  $C^\infty$  sur  $\mathbb{R}^d$ ,  $V$  et  $\nabla V$  ont une croissance polynômiale à l'infini et

$$+\infty \geq \liminf_{|x| \rightarrow +\infty} \frac{x \cdot \nabla V(x)}{|x|} \geq \nu > 0 \quad (\text{condition de drift}),$$

- (ii) le coefficient d'amortissement  $c(x, y)$  est  $C^\infty$  et borné, et il existe  $c, L > 0$  t.q.  $c^s(x, y) \geq cld > 0, \forall (|x| > L, y \in \mathbb{R}^d)$ .

Sous ces hypothèses on a l'existence d'une fonction de Lyapunov  $\psi \geq 1$

$$L\psi \leq -\alpha\psi + b\mathbb{I}_K$$

pour des constantes  $\alpha, b > 0$  et un compact  $K$ .

Le générateur infinitésimal  $L$  s'écrit

$$L = \frac{\sigma^2}{2} \Delta_y + y \nabla_x - (c(x, y)y + \nabla V) \cdot \nabla_y.$$

# Comportement en temps long, coercivité et mélange

Wu (2000), Bakry, Cattiaux & Guillin (2008), Villani (2009)

## Hypothèses $\mathcal{H}_1$

- (i) le potentiel  $V$  est borné inférieurement,  $C^\infty$  sur  $\mathbb{R}^d$ ,  $V$  et  $\nabla V$  ont une croissance polynômiale à l'infini et

$$+\infty \geq \liminf_{|x| \rightarrow +\infty} \frac{x \cdot \nabla V(x)}{|x|} \geq \nu > 0 \quad (\text{condition de drift}),$$

- (ii) le coefficient d'amortissement  $c(x, y)$  est  $C^\infty$  et borné, et il existe  $c, L > 0$  t.q.  $c^s(x, y) \geq cld > 0, \forall (|x| > L, y \in \mathbb{R}^d)$ .

Sous ces hypothèses on a l'existence d'une fonction de Lyapunov  $\psi \geq 1$

$$L\psi \leq -\alpha\psi + b\mathbb{I}_K$$

pour des constantes  $\alpha, b > 0$  et un compact  $K$ .

Le générateur infinitésimal  $L$  s'écrit

$$L = \frac{\sigma^2}{2} \Delta_y + y \nabla_x - (c(x, y)y + \nabla V) \cdot \nabla_y.$$

# Comportement en temps long, coercivité et mélange

## Propriétés:

- pas d'explosion,
- le processus est récurrent positif et admet une unique mesure de probabilité invariante  $\mu$ .

## Vers la coercivité et le mélange:

On note  $P_t f(z) = \mathbb{E}_z(f(Z_t))$  pour  $f$  bornée.  $\psi \in \mathbb{L}^1(\mu)$ .

*Il existe  $D > 0$  et  $\rho < 1$  t.q. pour tout  $z$ , pour toute fonction  $f$  t.q.  $\sup_z \frac{|f(z)|}{\psi(z)} < +\infty$ ,*

$$\left| P_t f(z) - \int f d\mu \right| \leq D \sup_a \left( \frac{|f(a) - \int f d\mu|}{\psi(a)} \right) \psi(z) \rho^t.$$

On en déduit que  $(Z_t := (X_t, Y_t), t \geq 0)$  est  $\beta$ -mélangeant.

# Comportement en temps long, coercivité et mélange

## Propriétés:

- pas d'explosion,
- le processus est récurrent positif et admet une unique mesure de probabilité invariante  $\mu$ .

## Vers la coercivité et le mélange:

On note  $P_t f(z) = \mathbb{E}_z(f(Z_t))$  pour  $f$  bornée.  $\psi \in \mathbb{L}^1(\mu)$ .

*Il existe  $D > 0$  et  $\rho < 1$  t.q. pour tout  $z$ , pour toute fonction  $f$  t.q.*  
 $\sup_z \frac{|f(z)|}{\psi(z)} < +\infty,$

$$\left| P_t f(z) - \int f d\mu \right| \leq D \sup_a \left( \frac{|f(a) - \int f d\mu|}{\psi(a)} \right) \psi(z) \rho^t.$$

On en déduit que  $(Z_t := (X_t, Y_t), t \geq 0)$  est  $\beta$ -mélangeant.

# Propriétés locales, hypoellipticité

$L$  s'écrit aussi sous forme "Stratonovich"

$$L = \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^d L_i^2 + L_0$$

avec les champs de vecteurs  $L_j$  définis par

(1) pour  $1 \leq i \leq d$ ,  $L_i = \frac{\partial}{\partial y_i}$ ,

(2)

$$L_0 = \sum_{k=1}^d y_k \frac{\partial}{\partial x_k} - \sum_{k=1}^d \left( (c(x, y)y)_k + \frac{\partial V}{\partial x_k} \right) \frac{\partial}{\partial y_k}.$$

On en déduit que

$$[L_i, L_0] = L_i L_0 - L_0 L_i = \frac{\partial}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^d \frac{\partial((c(x, y)y)_k)}{\partial y_i} \frac{\partial}{\partial y_k}$$

et donc que  $\{L_i, 1 \leq i \leq d; [L_i, L_0], 1 \leq i \leq d\}(z)$  génère  $\mathbb{R}^{2d}$  tout entier, pour chaque  $z$ .

# Propriétés locales, hypoellipticité

$L$  s'écrit aussi sous forme "Stratonovich"

$$L = \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^d L_i^2 + L_0$$

avec les champs de vecteurs  $L_j$  définis par

(1) pour  $1 \leq i \leq d$ ,  $L_i = \frac{\partial}{\partial y_i}$ ,

(2)

$$L_0 = \sum_{k=1}^d y_k \frac{\partial}{\partial x_k} - \sum_{k=1}^d \left( (c(x, y)y)_k + \frac{\partial V}{\partial x_k} \right) \frac{\partial}{\partial y_k}.$$

On en déduit que

$$[L_i, L_0] = L_i L_0 - L_0 L_i = \frac{\partial}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^d \frac{\partial((c(x, y)y)_k)}{\partial y_i} \frac{\partial}{\partial y_k}$$

et donc que  $\{L_i, 1 \leq i \leq d; [L_i, L_0], 1 \leq i \leq d\}(z)$  génère  $\mathbb{R}^{2d}$  tout entier, pour chaque  $z$ .

# Propriétés locales, hypoellipticité

⇒ hypoellipticité par le théorème de Hörnander.

**Conséquence:**  $\forall z, \forall t > 0$ ,

la loi  $P_t(z, \cdot)$  du processus  $Z_t$  partant de  $z$  à l'instant 0 a une densité  $C^\infty$   $p_t(z, \cdot)$  par rapport à la mesure de Lebesgue.

On a alors  $\mu(dz) = p_s(z)dz$  avec  $p_s C^\infty$ .

Comportement de  $p_t(z, \cdot)$  pour des petites valeurs de  $t$ ?

**Exemple pour mieux comprendre:**  $d = 1, c = V = 0$ . Alors  $Z_t$  est un vecteur gaussien de dimension deux, de moyenne  $(x_0 + y_0 t, y_0)$  et de matrice de covariance

$$\text{Var}(X_t) = \frac{t^3}{3}, \text{Var}(Y_t) = t, \text{Cov}(X_t, Y_t) = \frac{t^2}{2}.$$

On a

$$p_t(z, z) = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \frac{1}{t^2} e^{-\frac{y_0^2}{6t}} \quad \text{au lieu de} \quad \frac{1}{2\pi} \frac{1}{t}$$

qui est l'explosion classique pour le mouvement brownien.

# Propriétés locales, hypoellipticité

⇒ hypoellipticité par le théorème de Hörnander.

**Conséquence:**  $\forall z, \forall t > 0$ ,

la loi  $P_t(z, \cdot)$  du processus  $Z_t$  partant de  $z$  à l'instant 0 a une densité  $C^\infty$   $p_t(z, \cdot)$  par rapport à la mesure de Lebesgue.

On a alors  $\mu(dz) = p_s(z)dz$  avec  $p_s C^\infty$ .

Comportement de  $p_t(z, \cdot)$  pour des petites valeurs de  $t$ ?

**Exemple pour mieux comprendre:**  $d = 1, c = V = 0$ . Alors  $Z_t$  est un vecteur gaussien de dimension deux, de moyenne  $(x_0 + y_0 t, y_0)$  et de matrice de covariance

$$\text{Var}(X_t) = \frac{t^3}{3}, \text{Var}(Y_t) = t, \text{Cov}(X_t, Y_t) = \frac{t^2}{2}.$$

On a

$$p_t(z, z) = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \frac{1}{t^2} e^{-\frac{y_0^2}{\sigma t}} \quad \text{au lieu de} \quad \frac{1}{2\pi} \frac{1}{t}$$

qui est l'explosion classique pour le mouvement brownien.

# Propriétés locales, hypoellipticité

**Théorème (Konakov, Menozzi & Molchanov, 2010)**

*On considère le système suivant*

$$\begin{aligned}dX_t &= Y_t dt \\dY_t &= \sigma dW_t + b(X_t, Y_t) dt,\end{aligned}$$

*où  $b$  est supposé  $C^\infty$ , borné, à dérivées bornées. Soit  $T > 0$ . Alors  $\forall z = (x, y), \forall t > 0$ , la loi de  $Z_t = (X_t, Y_t)$  a une densité  $q_t(z, \cdot)$  par rapport à la mesure de Lebesgue et  $\exists C, C' > 0$  t.q. pour  $0 < t < T$ ,*

$$q_t(z, z') \leq C' \frac{1}{t^{2d}} \exp \left( -C \left[ \frac{|y - y'|^2}{4t} + \frac{3 \left| x' - x - \frac{t(y+y')}{2} \right|^2}{t^3} \right] \right).$$

*De plus,  $\exists t_0 > 0, \exists C'' > 0$  t.q.  $\forall 0 < t < t_0$ ,*

$$q_t((x, y), (x + ty, y)) \geq C'' \frac{1}{t^{2d}}.$$

# Propriétés locales, hypoellipticité

Corollaire (Cattiaux, León & P., 2012)

*On ne suppose plus le drift borné, à dérivées bornées.*

*$\forall z$ , pour tout voisinage ouvert borné  $U$  de  $z$ , on peut écrire*

$$p_t(z, \cdot) = q_t(z, \cdot) + r_t(z, \cdot)$$

*où  $q_t(z, z')$  satisfait la borne de Konakov et al. pour  $z' \in U$ , et  $r_t$  satisfait:  $\forall f$  bornée à support compact  $K \subset U$ ,*

$$\int f(z') r_t(z, z') dz' \leq D(U) e^{-\frac{D'(U)}{t}} \|f\|_\infty,$$

*où  $D(U)$  et  $D'(U)$  sont des constantes  $> 0$ .*

Remarque

*Avec un argument de localisation, on peut montrer  $\forall z' \in U, \forall 0 < t < T$*

$$p_t(z, z') \leq q_t(z, z') + C(U) e^{-\frac{C'(U)}{t}}.$$

# Propriétés locales, hypoellipticité

Comportement de  $p_t(z, \cdot)$  en temps long? [Cattiaux, 1990]

$\forall (z, z'), \exists 0 < C(z') \text{ t.q. } \forall t \geq 0$

$$p_t(z, z') \leq C(z') < +\infty.$$

Dans la suite, nous supposerons que les hypothèses  $\mathcal{H}_i$ ,  $i = 1, 2$  sont vérifiées et donc que toutes ces bonnes propriétés sont acquises !

# Plan de l'exposé

- 1 Introduction
- 2 Problème d'estimation
- 3 Propriétés probabilistes du modèle
- 4 Résultats d'estimation, schéma de démonstration**
- 5 Etude numérique

# Estimation de la densité invariante

**Observations complètes:**

$$\check{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K \left( \frac{x - X_i}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_i}{b_{2,n}} \right).$$

Ici on suppose qu'on n'observe pas la composante  $y$ .

**Observations incomplètes:** pas de discrétisation  $h_n$

$$\hat{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K \left( \frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - \frac{X_{(i+1)h_n} - X_{ih_n}}{h_n}}{b_{2,n}} \right).$$

On choisit un noyau  $K : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}_+$  de classe  $C^2$ , à support compact avec  $\int K(x, y) dx dy = 1$ . On suppose de plus  $\exists m \in \mathbb{N}^*$  t.q. pour tout polynôme non ct  $P(x, y)$  de degré  $\leq m$ ,  $\int P(u, v) K(u, v) du dv = 0$ .

# Estimation de la densité invariante

**Observations complètes:**

$$\check{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K \left( \frac{x - X_i}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_i}{b_{2,n}} \right).$$

Ici on suppose qu'on n'observe pas la composante  $y$ .

**Observations incomplètes:** pas de discrétisation  $h_n$

$$\hat{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K \left( \frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - \frac{X_{(i+1)h_n} - X_{ih_n}}{h_n}}{b_{2,n}} \right).$$

On choisit un noyau  $K : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}_+$  de classe  $C^2$ , à support compact avec  $\int K(x, y) dx dy = 1$ . On suppose de plus  $\exists m \in \mathbb{N}^*$  t.q. pour tout polynôme non ct  $P(x, y)$  de degré  $\leq m$ ,  $\int P(u, v) K(u, v) du dv = 0$ .

# Estimation de la densité invariante

**Observations complètes:**

$$\check{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K \left( \frac{x - X_i}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_i}{b_{2,n}} \right).$$

Ici on suppose qu'on n'observe pas la composante  $y$ .

**Observations incomplètes:** pas de discrétisation  $h_n$

$$\hat{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K \left( \frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - \frac{X_{(i+1)h_n} - X_{ih_n}}{h_n}}{b_{2,n}} \right).$$

On choisit un noyau  $K : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}_+$  de classe  $C^2$ , à support compact avec  $\int K(x, y) dx dy = 1$ . On suppose de plus  $\exists m \in \mathbb{N}^*$  t.q. pour tout polynôme non ct  $P(x, y)$  de degré  $\leq m$ ,  $\int P(u, v) K(u, v) du dv = 0$ .

# Estimation de la densité invariante

- (i)  $b_{1,n}$ ,  $b_{2,n}$  et  $h_n \rightarrow 0$ ,
- (ii)  $n b_{1,n}^d b_{2,n}^d \rightarrow +\infty$ ,
- (iii)  $\frac{b_{1,n} b_{2,n}}{h_n^2} \rightarrow 0$ ,
- (iv)  $m$  est t.q.  $n b_{1,n}^d b_{2,n}^d \max(b_{1,n}, b_{2,n})^{2(m+1)} \rightarrow 0$ ,
- (v)  $nh_n \frac{b_{1,n}^d}{b_{2,n}^{2+d}} \rightarrow 0$ ,
- (vi)  $\exists 1 < p$  t.q.  $nh_n^2 \frac{b_{1,n}^{d(2-p)/p}}{b_{2,n}^{2+d}} \rightarrow 0$ ,
- (vii)  $\frac{\sqrt{b_{1,n}^d b_{2,n}^d}}{\sqrt{nh_n^{3d}}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$ .

## Théorème (Cattiaux, León & Prieur, 2012)

Soit  $z_0 \in \mathbb{R}^{2d}$ . On construit notre estimateur en prenant  $Z_0 = z_0$ , alors  $\forall z = (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}$ .

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\hat{p}_s(x, y) - p_s(x, y)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N} \left( 0, p_s(x, y) \int K^2(s, t) ds dt \right).$$

# Estimation de la densité invariante

## Schéma de démonstration:

1) on introduit

$$\tilde{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K \left( \frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}} \right),$$

- 2) on montre le théorème limite central pour l'estimateur intermédiaire, en régime stationnaire,
- 3) on montre que le reste tend vers zéro en norme  $\mathbb{L}^2$ .
- 4) Pour les étapes 1) à 3) on a négligé le terme de biais, qu'il reste donc à contrôler à la fin.
- 5) On montre qu'on n'a pas besoin de partir du régime stationnaire, on peut partir de n'importe quel point  $z$  au temps initial.

# Estimation de la densité invariante

**Points 1) et 2)** on va montrer un tlc triangulaire pour des tableaux mélangeants.

Soit  $S_n = Z_{n,1} + \dots + Z_{n,k_n}$ , avec  $k_n \rightarrow +\infty$  et pour tout  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $(Z_{n,k})_{k \geq 1}$  une **suite stationnaire centrée** vérifiant  $\mathbb{E}(Z_{n,j}Z_{n,0}) \leq \alpha_n(j)$  pour une suite de réels positifs  $(\alpha_n(j))_{n \in \mathbb{N}^*, 1 \leq j \leq k_n - 1}$ .

$\forall n \in \mathbb{N}^*, \forall 1 \leq k \leq k_n$ , on définit  $S_{k,n} = Z_{n,1} + \dots + Z_{n,k}$ . On suppose alors  $\exists \gamma, \beta > 0$  t.q.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Var} S_n = \gamma^2 > 0 \text{ et } v_{n,k} = \text{Var} S_{k,n} - \text{Var} S_{k-1,n} \geq \frac{\beta}{n}.$$

On note

$$M_n = \sup_{1 \leq k \leq k_n} \|Z_{n,k}\|_\infty, \quad \delta_n = \sup_{1 \leq k \leq k_n} \mathbb{E}(|Z_{n,k}|)$$

$$\Delta_{n,j} = \mathbb{E}(|Z_{n,0}Z_{n,j}|).$$

# Estimation de la densité invariante

Théorème (Cattiaux, León & P., 2012; Coulon-Prieur & Doukhan, 2000)

$$\text{Si } (k_n M_n + k_n^{\frac{2}{3}}) M_n \delta_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0, \quad k_n^{2/3} \sum_{j=1}^{k_n-1} \min(\alpha_n(j), \Delta_{n,j}) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0,$$

$$(1 + M_n) \sum_{j=1}^{k_n-1} (k_n - j) \min(\alpha_n(j), (\Delta_{n,j} + \delta_n^2)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

Alors on a

$$S_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \gamma^2) .$$

On pose

$$Z_{n,k} = \frac{1}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} \left\{ K \left( \frac{x - X_{kh_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{kh_n}}{b_{2,n}} \right) - \mathbb{E} K \left( \frac{x - X_0}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_0}{b_{2,n}} \right) \right\} .$$

# Estimation de la densité invariante

**Principale difficulté:** le pas de discrétisation  $h_n$  tend vers zéro et la densité jointe de  $(Z_0, Z_{jh_n})$  explose pour notre diffusion. On peut conclure l'étape 1) sous les hypothèses (i), (ii) et (iii).

**Point 3):** Pour cette étape on exploite "finement" les hypothèses de régularité des coefficients de la diffusion et du noyau  $K$ . On peut conclure cette étape si on rajoute les hypothèses (v) et (vi).

**Point 4):** Le terme de biais ne dépend pas des propriétés de mélange. On utilise la régularité de  $p_s$  qui est  $C^\infty$  et les hypothèses sur le noyau  $K$ . Il faut alors rajouter l'hypothèse (iv).

**Point 5):** On utilise la convergence à vitesse exponentielle vers la mesure stationnaire.

# Estimation de la densité invariante

**Principale difficulté:** le pas de discrétisation  $h_n$  tend vers zéro et la densité jointe de  $(Z_0, Z_{jh_n})$  explose pour notre diffusion. On peut conclure l'étape 1) sous les hypothèses (i), (ii) et (iii).

**Point 3):** Pour cette étape on exploite "finement" les hypothèses de régularité des coefficients de la diffusion et du noyau  $K$ . On peut conclure cette étape si on rajoute les hypothèses (v) et (vi).

**Point 4):** Le terme de biais ne dépend pas des propriétés de mélange. On utilise la régularité de  $p_s$  qui est  $C^\infty$  et les hypothèses sur le noyau  $K$ . Il faut alors rajouter l'hypothèse (iv).

**Point 5):** On utilise la convergence à vitesse exponentielle vers la mesure stationnaire.

# Estimation de la densité invariante

**Principale difficulté:** le pas de discrétisation  $h_n$  tend vers zéro et la densité jointe de  $(Z_0, Z_{jh_n})$  explose pour notre diffusion. On peut conclure l'étape 1) sous les hypothèses (i), (ii) et (iii).

**Point 3):** Pour cette étape on exploite "finement" les hypothèses de régularité des coefficients de la diffusion et du noyau  $K$ . On peut conclure cette étape si on rajoute les hypothèses (v) et (vi).

**Point 4):** Le terme de biais ne dépend pas des propriétés de mélange. On utilise la régularité de  $p_s$  qui est  $C^\infty$  et les hypothèses sur le noyau  $K$ . Il faut alors rajouter l'hypothèse (iv).

**Point 5):** On utilise la convergence à vitesse exponentielle vers la mesure stationnaire.

# Estimation de la densité invariante

**Principale difficulté:** le pas de discrétisation  $h_n$  tend vers zéro et la densité jointe de  $(Z_0, Z_{jh_n})$  explose pour notre diffusion. On peut conclure l'étape 1) sous les hypothèses (i), (ii) et (iii).

**Point 3):** Pour cette étape on exploite "finement" les hypothèses de régularité des coefficients de la diffusion et du noyau  $K$ . On peut conclure cette étape si on rajoute les hypothèses (v) et (vi).

**Point 4):** Le terme de biais ne dépend pas des propriétés de mélange. On utilise la régularité de  $p_s$  qui est  $C^\infty$  et les hypothèses sur le noyau  $K$ . Il faut alors rajouter l'hypothèse (iv).

**Point 5):** On utilise la convergence à vitesse exponentielle vers la mesure stationnaire.

# Plan de l'exposé

- 1 Introduction
- 2 Problème d'estimation
- 3 Propriétés probabilistes du modèle
- 4 Résultats d'estimation, schéma de démonstration
- 5 Etude numérique

# Etude numérique

## Oscillateur harmonique:

$$\begin{cases} dX_t &= Y_t dt \\ dY_t &= dW_t - 2(Y_t + X_t)dt \end{cases}$$

On a alors

$$p_s(x, y) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \exp(-4x^2 - 2y^2).$$

On utilise un schéma d'Euler explicite pour simuler une discrétisation  $(\tilde{X}_i, \tilde{Y}_i)_{i \in \mathbb{N}}$  de  $(X_t, Y_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ :

$$\begin{cases} \tilde{X}_{i+1} - \tilde{X}_i &= \tilde{Y}_i \delta \\ \tilde{Y}_{(i+1)} - \tilde{Y}_i &= (W_{(i+1)\delta} - W_{i\delta}) - 2(\tilde{Y}_i + \tilde{X}_i)\delta \end{cases}$$

avec  $(\tilde{X}_0, \tilde{Y}_0) = (0, 0)$ . On prend le pas  $\delta = \frac{1}{10} h_n$ .

## Etude numérique

On prend  $b_{1,n} = n^{-\alpha_1} = n^{-0.92}$ ,  $b_{2,n} = n^{-\alpha_2} = n^{-0.02}$  et  $h_n = n^{-\gamma} = n^{-0.15}$ . On choisit alors le noyau d'Epanechnikov

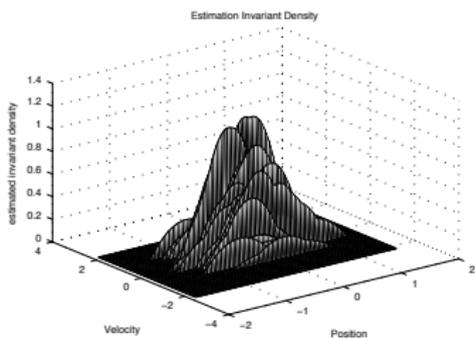
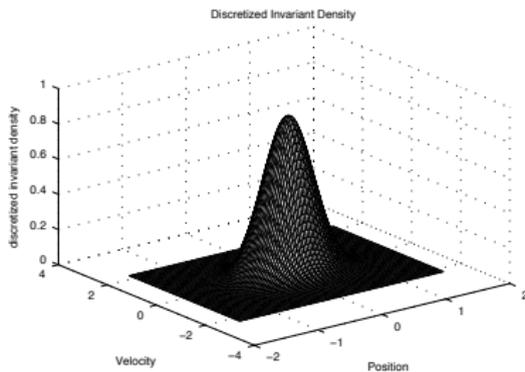
$$K(u, v) = \frac{3}{4}(1 - u^2)\mathbb{I}_{|u| \leq 1} \times \frac{3}{4}(1 - v^2)\mathbb{I}_{|v| \leq 1}.$$

$n$	100	1000	10000
error	0.2098	0.1412	0.1276

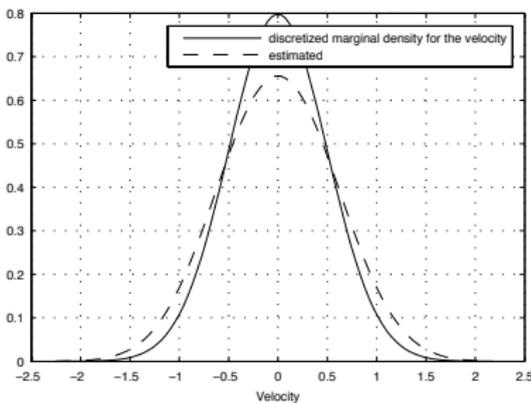
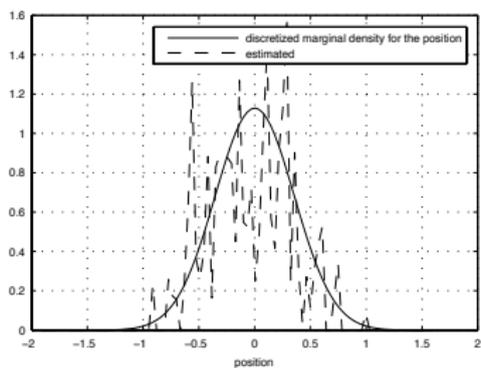
**Table:** Evolution de l'erreur quadratique moyenne intégrée pour  $\alpha_1 = 0.92$ ,  $\alpha_2 = 0.02$ ,  $\gamma = 0.15$ ,  $L = 100$  et  $M = 30$  et différentes tailles d'échantillon

L'erreur quadratique moyenne a été estimée avec  $M = 30$  répétitions, sur une grille de  $L = 100$  points.

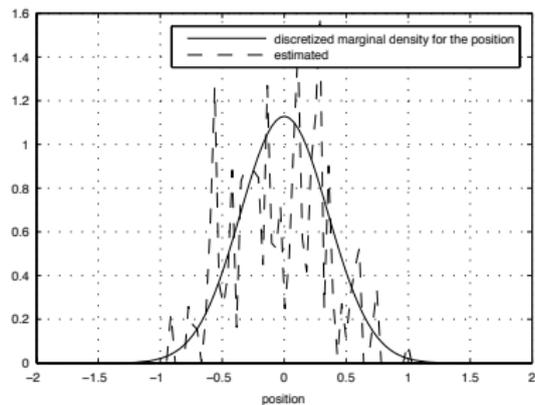
# Etude numérique



# Etude numérique



# Etude numérique



L'estimation pour la position est très bruitée, celà vient du choix de  $\alpha_1$ , contraint par les hypothèse entre  $h_n$  et les paramètres de fenêtre.

# Etude numérique

## Oscillateur de Kramers:

$$\begin{cases} dX_t &= Y_t dt \\ dY_t &= dW_t - (Y_t + X_t^3 - X_t) dt \end{cases}$$

Le potentiel est alors  $V(x) = \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}$  et

$$p_s(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^4}{2} + x^2 - y^2\right).$$

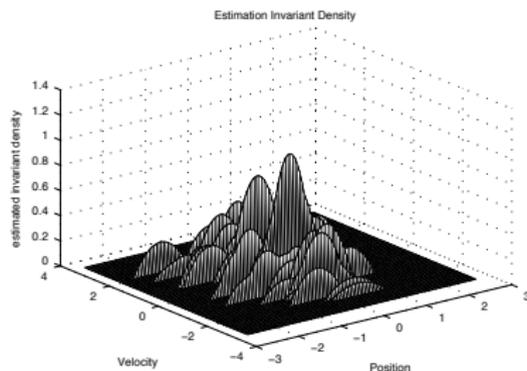
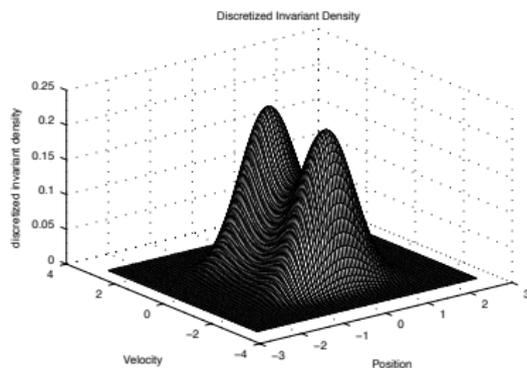
On utilise encore un schéma d'Euler explicite pour simuler une discrétisation  $(\tilde{X}_i, \tilde{Y}_i)_{i \in \mathbb{N}}$  de  $(X_t, Y_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$  avec pas  $\delta = \frac{1}{10} h_n$ .

# Etude numérique

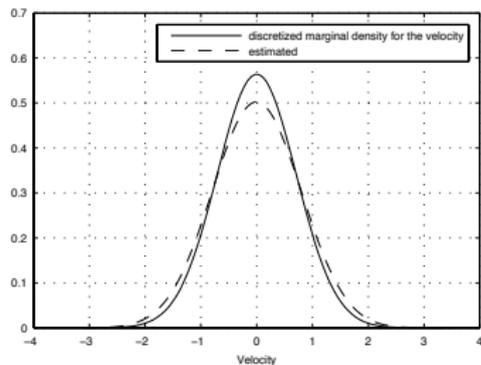
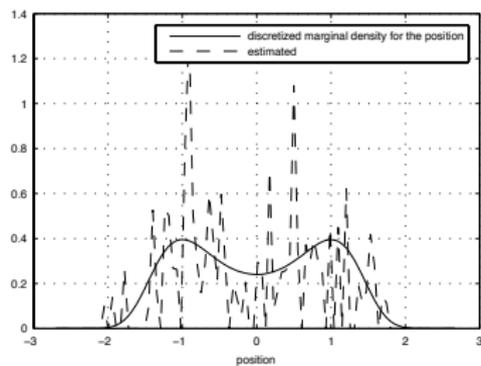
$n$	100	1000	5000
error	0.0953	0.0881	0.0751

**Table:** Evolution de l'erreur quadratique moyenne intégrée pour  $\alpha_1 = 0.92$ ,  $\alpha_2 = 0.02$ ,  $\gamma = 0.15$ ,  $L = 100$  et  $M = 30$  et différentes tailles d'échantillon

# Etude numérique



# Etude numérique



# Conclusion, perspectives

**Conclusion** : on a obtenu un estimateur non paramétrique de la densité invariante de diffusions hypoelliptiques, dans le cadre d'observations partielles. Pour cet estimateur, on obtient un théorème de la limite centrale. On a des conditions obtenues par majoration, quid de l'optimalité?

Travail soumis.

<http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00739136>

**Perspectives** :

- complexifier les systèmes pour approcher au mieux les problèmes environnementaux (Fokker-Planck non linéaires, modèles confinés, variances dégénérées, ...),
- estimation du terme de drift (en cours, premiers résultats pour des données "très" haute fréquence),
- estimation du terme de volatilité (en cours, premiers résultats lorsque la variance est constante, non dégénérée).

# Conclusion, perspectives

**Conclusion** : on a obtenu un estimateur non paramétrique de la densité invariante de diffusions hypoelliptiques, dans le cadre d'observations partielles. Pour cet estimateur, on obtient un théorème de la limite centrale. On a des conditions obtenues par majoration, quid de l'optimalité?

Travail soumis.

<http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00739136>

## Perspectives :

- complexifier les systèmes pour approcher au mieux les problèmes environnementaux (Fokker-Planck non linéaires, modèles confinés, variances dégénérées, ...),
- estimation du terme de drift (en cours, premiers résultats pour des données "très" haute fréquence),
- estimation du terme de volatilité (en cours, premiers résultats lorsque la variance est constante, non dégénérée).

## Références

[Bakry, Cattiaux and Guillin, 2008]

Rate of convergence for ergodic continuous Markov processes : Lyapunov versus Poincaré. *J. Func. Anal.* **254**, p. 727-759.

[Cattiaux, Chafai and Guillin, 2011]

Central Limit Theorem for ergodic Markov Diffusions. To appear in ALEA. Available at ArXiv 1104.2198 math[pr].

[Coulon-Prieur and Doukhan, 2000]

A CLT for triangular arrays of weakly dependent sequences. *Statist. Probab. Letters* **47**, p. 61-68 (2000).

[Down, Meyn and Tweedie, 1995]

Exponential and uniform ergodicity of Markov processes. *Ann. Prob.*, **23(4)**, p. 1671-1691.

[Konakov, Menozzi and Molchanov, 2010]

Explicit parametrix and local limit theorems for some degenerate diffusion processes. *Ann. Institut Henri Poincaré* **46 (4)**, p. 908-923.

# Références

[Pokern, Stuart and Wiberg, 2009]

Parameter estimation for partially observed hypoelliptic diffusions. *J. Roy. Stat. Soc. B* **71**, p. 49-73.

[Samson and Thieullen, 2012]

Contrast estimator for completely or partially observed hypoelliptic diffusion. *Stochastic Processes and their Applications*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.spa.2012.04.006>.

[Villani, 2009]

Hypocoercivity. *Mem. Amer. Math. Soc.*, 202(950).

[Wu, 2001]

Large and moderate deviations and exponential convergence for stochastic damping Hamiltonian systems. *Stochastic Processes and their Applications* **91**, p. 205-238.