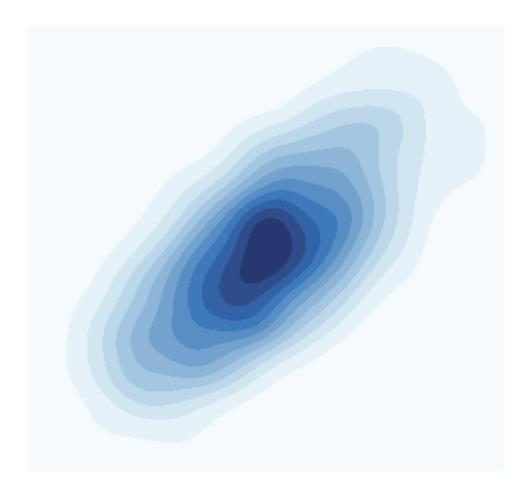
Simulation conditionnelle d'un processus gaussien

NEEL Pauline, PETROS Russom Samson, RAKOTOVAO Jonathan, VOYLES Evan $10~\mathrm{Mai}~2022$



Any one who considers arithmetical methods of producing random digits is, of course, in a state of sin

John von Neumann

Câbles Sous-marin

Contents

| 1 | Introduction | 2 |
|---|--|-----------------------|
| 2 | Simulation classique 2.1 Génération de variables aléatoires | 2 3 3 4 5 |
| 3 | Methode d'acceptation-rejet 3.1 Loi normale | |
| 4 | Simulation géostatistique 4.1 Motivation | 10 10 |
| 5 | R shiny | 11 |
| 6 | Conclusion | 11 |
| 7 | Ce que nous pourrions amélirorer 7.1 Vitesse | 12 12 |
| 8 | Réflexions | 12 |

1 Introduction

L'objectif principal de ce projet est d'étudier et d'implémenter une procédure permettant de générer des simulations conditionnelles de processus gaussiens à l'aide de la méthode spectrale et du krigeage. Nous procéderons pour cela pas à pas.

La première étape sera d'abord d'appréhender ce qu'est un algorithme de simulation et de comprendre comment cela fonctionne. Nous commencerons donc ce projet par une question simple : comment générer des réalisations d'une variable aléatoire normale (cadre univarié). Pour y répondre, nous allons s'intéresser à la méthode d'acceptation-rejet ainsi qu'à la méthode de Box-Muller.

On se placera ensuite dans un cadre multivarié: nous utiliserons la décomposition de Cholesky de la matrice de variance-covariance afin de générer des réalisations d'un vecteur gaussien. Enfin, dans un cadre spatial, nous simulerons des processus gaussiens grâce à la méthode spectrale, puis conditionnerons les simulations obtenues à l'aide du krigeage. L'implémentation des différents algorithmes se fera sous R.

De plus, en utilisant Rshiny nous coderons une application web qui permettra à des utilisateurs de générer puis de visualiser des réalisations de variables aléatoires, vecteurs ou processus gaussiens.

2 Simulation classique

2.1 Génération de variables aléatoires

Un ordinateur n'est qu'un gros agencement complexe de circuits. Régnées par les lois physiques, les opérations provenant du mouvement des électrons sont encodées par les fonctions booléennes. Les *fonctions* - dans le sens mathématique - sont des objets purement déterministes. Autrement dit, une fonction associe à une donnée d'entrée, une unique valeur dans l'espace d'arrivée.

Si on lui donne plusieurs fois la même valeur, par exemple x_1 et x_2 telles que $x_1 = x_2$, la définition d'une fonction implique que $f(x_1) = f(x_2)$. D'où vient l'énigme : Comment générer des variables aléatoires alors que nous disposons seulement de méthodes déterministes?

Nous ne pouvons pas à répondre à cette question plus éloquemment que le fait John von Neumann, l'un des meilleurs mathématiciens, pionniers, informaticiens de tous les temps; générer des variables aléatoires sur un ordinateur est tout simplement impossible. Cependant, cela ne nous empêchera pas d'essayer quand même. Il s'agira de produire des variables dites pseudo-aléatoires.

2.2 Loi uniforme

On commence notre projet en étudiant la loi la plus simple parmi les lois usuelles - la loi uniforme. Tout d'abord, parce qu'elle est simple, mais la loi uniforme va également nous permettre de construire des algorithmes plus complexes, notamment la méthode de la transformée inverse ou la méthode de rejet. Ainsi, cela nous permettra de simuler différentes lois, comme la loi normale, la loi exponentielle, etc.

Il s'agira principalement d'échantillonner une variable $X \sim \mathcal{U}(0,1)$ puis ensuite d'effectuer des manipulations mathématiques pour produire une variable suivant une autre loi ciblée.

Alors sans plus tarder, on formalise nos objectifs. Le principe est le suivant: nous allons générer une suite (x_n) à partir d'une graine x_0 et une fonction $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ telles que

$$\begin{cases} x_0 \in \mathbb{R} \\ x_n = f(x_{n-1}) \quad \forall n \in \mathbb{N} \end{cases}$$

On souhaite trouver une fonction qui vérifie certaines qualités désirées. Par exemple, on veut que notre fonction ait une période suffisamment longue. En effet, nous savons qu'elle sera périodique, il est donc importante que sa période soit très grande pour pas qu'un schéma soit visible.

On souhaite également qu'elle produise des valeurs uniformément réparties sur un intervalle. Etudions la fonction $x \mapsto (x+1) \% 2$, où % est l'opération de modulos et on fixe une graine $x_0 = 1$.

$$f(x_0) = (1+1)\% 2 = 2\% 2 = 0$$

 $f(x_1) = (0+1)\% 2 = 1\% 2 = 1$
 $f(x_2) = (1+1) = 0$

Cette fonction produit alors la suite

```
\{1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, ...\}
```

dont la période est 2 et évidemment dont les valeurs ne sont pas aussi variées qu'on le souhaite. Nous verrons plus précisement ce que "suffisamment variés" veut dire. Pour l'instant, on se contente de dire que cette suite-là n'atteint pas nos attentes.

Heureusement pour nous, il existe de nombreuses fonctions qui remplissent nos critères recherchés, ce sont des fonctions pseudo-aléatoires, elles sont déterminées mais leurs comportements s'approchent de l'aléatoire.

2.2.1 Générateur congruentiel linéaire

La méthode la plus directe à implémenter pour générer une telle suite est un générateur congruentiel linéaire. Congruentiel parce qu'il s'agit d'une opération modulo et linéaire vu qu'il y a une transformation affine. Dans le cas général, on considère les fonctions de la forme:

$$f(x; a, c, m) = (ax + c) \mod m$$
.

D'ailleurs, la fonction étudiée dans la section précédente est un générateur congruentiel linéaire dont les paramètres sont a=1, c=1, et m=2. Ne vous inquiétez pas, il existe un large panel de générateurs congruentiels linéaires (LCG). Les choix des paramètres utilisés par les logiciels connus sont détaillés sur une page Wikipédia et leurs propriétés sont déjà bien étudiées. Vu que l'objectif de notre projet est d'approfondir la connaissance autour des méthodes générant des variables (pseudo) aléatoires, on a décidé d'implémenter notre propre LCG hybride. Pour m, on choisit $2^{31}-1$, un nombre de Mersenne qui est très connu. Pour a, on s'amuse en choisissant 12345678. Finalement, on affecte à l'incrémenteur c la valeur 1.

$$f_{sousmarin}(x) = (12345678x + 1) \mod (2^{31} - 1)$$

2.2.2 Implémentation en R

Dans ce projet, nous faisons le choix d'implémenter notre propre version de runif afin de comprendre en profondeur la notion d'aléatoire. En effet, toutes les autres lois que nous allons pouvoir simuler, seront constuites à partir de runif. Il était donc important pour nous de faire cette étape. Afin d'implémenter une version de notre fonction en language de programmation R, on doit s'éloigner un peu de la pureté de la théorie et se salir les mains dans le code ! C'est-à-dire que l'on ne va pas garder une valeur x_0 pour toute l'éternité; on aura une variable globale déterminant l'état du générateur qui serait mise à jour quand on veut générer une suite de valeurs.

```
# Initialiser la graine (une variable globale) a 0
      g_SEED_SOUSMARIN <- 0
       # similaire a la fonction de R set.seed, mettre a jour
       # la valeur de g_SEED_SOUSMARIN
       set_seed <- function(seed) {</pre>
           assign("g_SEED_SOUSMARIN", seed, envir = .GlobalEnv)
       # La fonction LCG pure qu'on a definie en partie 3
       f_sousmarin <- function(x) {</pre>
           (12345678 * x + 1) %% (2^31 - 1)
       # Generer une suite des variables de taille n en mettant a jour l'etat
16
       # de la graine a chaque pas.
      gen_suite <- function(n) {</pre>
18
           suite <- vector ("numeric", n) # allouer un vecteur de taille n
           \quad \quad \textbf{for} \ (i \ in \ \textbf{seq\_}len\,(n)\,) \ \{
                x_i <- f_sousmarin(g_SEED_SOUSMARIN)</pre>
                suite [[i]] <- x_i
                set_seed(x_i)
           }
26
```

```
28 suite
29 }
```

On a donc implémenté notre propre LCG, f_sousmarin. Pour renvoyer une valeur dans l'intervalle]0, 1[afin de simuler $X \sim \mathcal{U}(0,1)$, on remarque que la division modulo m renvoie une valeur entre]0, m-1[. Pour le normaliser, on divise par le facteur $m-1 \equiv 2^{31}-2$.

```
r_std_unif <- function(n) {

suite <- vector("numeric", n)

for (i in seq_len(n)) {
    x_i <- f_sousmarin(g_SEED_SOUSMARIN)
    suite[[i]] <- x_i / (2^31 - 2)
    set_seed(x_i)
}

suite

suite
</pre>
```

Si on considère le cas général où l'on souhaiterait générer des variables uniformément réparties dans l'intervalle]a, b[, on commence tout d'abord par échantillonner $X \sim \mathcal{U}(0,1)$. Ensuite, on multiplie X par l'écart entre a et b, (b-a), pour produire une variable $X_{b-a} \in]0, b-a[$. Finalement, on décale X_{b-a} en additionnant a pour finir avec la variable aléatoire uniformément répartie dans l'intervalle]0+a,b-a+a[$\equiv]a,b[$. Après cette transformation affine appliquée à X, nous avons $X_{a,b} \sim \mathcal{U}(a,b)$.

On imite le comportement et la signature de la fonction dans R de base runif avec l'implémentation suivante

```
r_unif <- function(n, min = 0, max = 1) {

spread <- max - min
suite <- vector("numeric", n)

for (i in seq_len(n)) {
    x_i <- f_sousmarin(g_SEED_SOUSMARIN)
    suite[[i]] <- (x_i * spread) / (2^31 - 2) + min
    set_seed(x_i)
}

suite
</pre>
```

2.2.3 Vérification pour la loi uniforme

Comment vérifier que notre LCG produit des valeurs qui sont véritablement réparties uniformément ? Quand il s'agit de produire des milliards d'observations, on ne peut pas facilement vérifier à la main si notre fonction n'a pas de structure évidente (sauf la période qui est mathématiquement inévitable). Pourtant, on peut commencer par une exploration visuelle.

Pour ce faire, on utilise la fonction r_std_unif définie au-dessus pour générer 1E6 valeurs aléatoires qui sont supposées être uniformément réparties sur l'intervalle]0,1[.

On peut aussi facilement vérifier que les statistiques de notre échantillon correspondent bien à celles que l'on attend.

```
library (sousmarin)

set_seed (0)

x <- r_std_unif(1E6)

mu <- mean(x) # 0.5000658

sig <- std(x) # 0.2877586
```

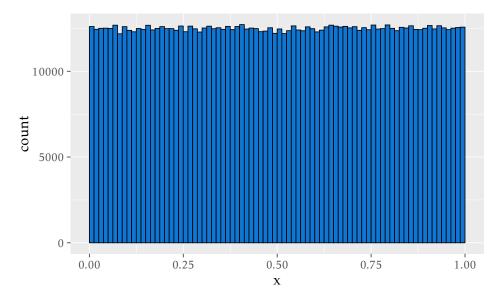


Figure 1: Histogramme généré à partir d'un appel à r_std_unif avec n = 1000000. On initialise la graine de notre générateur avec un appel à set_seed(0).

On réitère le simple fait qu'il n'y a **rien d'aléatoire** avec la génération de ces valeurs et que vous pouvez vérifier leur quantité en téléchargeant notre package **ICI**¹.

On passe à l'analyse. Avec notre échantillon x de taille 1E6, le moyen de l'échantillon $\bar{x}=0.50006584$ et l'écart type de l'échantillon est s=0.2877586. Comme la moyenne d'une loi uniforme est $\frac{b-a}{2}=\frac{1-0}{2}=0.5$, nous sommes ravis de voir que $\bar{x}=0.50006584\sim0.5$. Parallèlement, l'écart type d'une loi uniforme est $\frac{b-a}{\sqrt{12}}=\frac{1-0}{\sqrt{12}}=0.2886751$, ce qui est proche de notre s=0.2877586.

2.3 Simulation de différentes lois

Maintenant que nous avons compris la notion de "aléatoire" et de "pseudo-aléatoire", et que nous avons saisi comment fonctionne la fonction runif de R, nous allons pouvoir générer des variables aléatoires plus complexes. Les algorithmes seront tous contruits à partir de runif.

2.4 Méthode de transformation inversée

La méthode de transformation inversée consiste à échantillonner une variable aléatoire $X \sim \mathcal{U}(0,1)$ et à utiliser l'expression analytique de la fonction de répartition d'une loi cible. Comme la fonction de répartition F(x) est une fonction croissante définie sur \mathbb{R}^n à valeurs dans [0,1], si on peut trouver une expression fermée de son inverse $F^{-1}:[0,1] \longrightarrow \mathbb{R}$, on applique la méthode de transformation inversée afin de réaliser des simulations.

Pour éclairer la méthode, on va étudier la fonction de répartition de la loi exponentielle. Pour rappel, une variable aléatoire suivant une loi exponentielle de paramètre λ a pour fonction de densité $f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$ pour $x \ge 0$, 0 sinon. On a choisi cette loi parce qu'elle est munie d'une fonction de répartition facilement calculable et surtout dont l'inverse a une expression analytique. Calculons sa fonction de

 $^{^{1}}$ On mettra ici un lien du github (voire un lien de CRAN????) et des instructions pour télécharger notre package

répartition:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)dt$$

$$= \int_{-\infty}^{0} 0dt + \int_{0}^{x} \lambda e^{-\lambda t} dt$$

$$= 0 + \left[-e^{-\lambda t} \right]_{0}^{x}$$

$$= 1 - e^{-\lambda x}$$

Calculons maintenant son inverse, F^{-1} :

$$y = 1 - e^{-\lambda(F^{-1}(y))}$$

$$e^{\lambda(F^{-1}(y))} = 1 - y$$

$$-\lambda F^{-1}(y) = \ln(1 - y)$$

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

La loi exponentielle est l'une des quelques lois où l'on peut facilement trouver l'inverse de la fonction de répartition. Cela nous permet d'échantilloner une variable aléatoire $X \sim \exp(\lambda)$ efficacement à partir d'une seule réalisation d'une loi uniforme. Il s'agit tout simplement de tirer $U \sim \mathcal{U}(0,1)$ et ensuite évaluer $X = F^{-1}(U)$.

L'implémentation en R ne prend qu'une seule ligne:

```
rexp_inv <- function(n, lambda = 1) {

# Generate n realizations of a uniform random variable n times

(-1 / lambda) * log(runif(n, 0, 1))

}
```

3 Methode d'acceptation-rejet

Comment faire lorsque l'on veut simuler une loi dont on ne peut pas calculer l'inverse de la fonction de répartition ? Une solution est d'utiliser la méthode d'acceptation-rejet.

Prenons un exemple simple pour mieux comprendre. Notons f la fonction densité de loi que l'on souhaite simuler : f(x) = 6x(1-x) sur le compact [0, 1].

Le principe est simple : on va borner f par une fonction g que l'on sait simuler. Ici, on prendra la fonction constante g(x) = 1.5. On simule des points uniformément répartis sous la courbe de g(x). Supposons que l'on souhaite générer 10 simulations, on tire alors 10 réalisations de $X \sim \mathcal{U}(0,1)$: on aura les abscisses des points.

Ensuite, pour chaque abscisse, on tire $Y \sim \mathcal{U}(0,1.5)$ ce qui représentera l'ordonnée de notre point. On aura alors tiré des points uniformément répartis dans le rectangle. Finalement, on garde seulement ceux se trouvant en dessous de la fonction f(x). Ainsi, l'ensemble de ces points seront bien distribués selon la loi f(x).

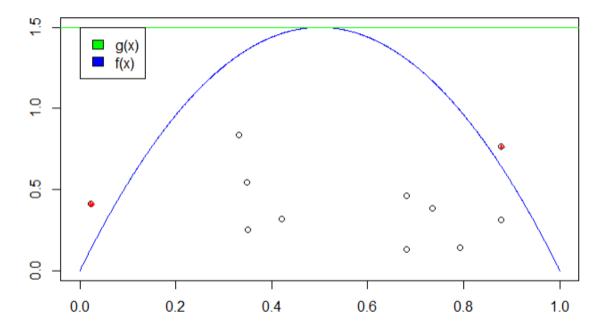


Figure 2: app shiny pour faire la simulation

Sur ce graphique, on voit que les points en rouge se situant au-dessus de f(x) seront rejetés tandis que les points blancs se situant en-dessous de la courbe seront acceptés.

On peut facilement implémenter l'algorithme d'acceptation-rejet pour une loi quadratique suivant la densité f(x) = 6x(1-x) sur [0,1] sous R :

```
rquad <- function(n) {
            ind <- function(x) { 0 \le x & x \le 1 } # x \setminus in [0, 1]
            # Uniform density between (0, 1)
            f \leftarrow function(x) {
                 6 * x * (1 - x) * ind(x)
            g \leftarrow function(x) {
                 1 * ind(x)
            c <- 1.5
            out \leftarrow rep(0, n)
14
15
            for (i in seq_len(n)) {
                 reject <- TRUE
18
                 z <- 0
19
                 while (reject) {
                      y <- runif(1)
                      u \leftarrow runif(1)
24
                      reject \leftarrow u > (f(y) / (c * g(y)))
                      z <- y
28
                 out [[ i ]] \leftarrow z
30
            }
31
32
            out
```

On simule alors n = 10,000 simulations avec rquad (1e5) pour vérifier si notre algorithm produit bien une variable aléatoire dont la densité f(x) = 6x(1-x):

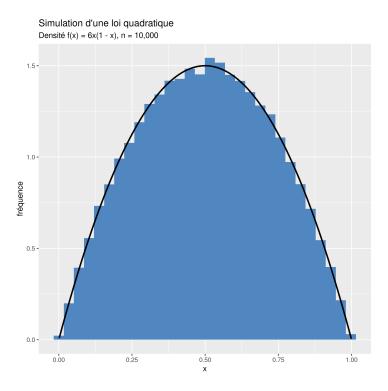


Figure 3: 10,000 réalisations d'une variable aléatoire dont la densité est une fonction quadratique. On a vérifié graphiquement que la méthode d'acceptation-rejet implémenté en rquad permet de simuler une variable aléotoire avec f(x) = 6x(1-x).

3.1 Loi normale

On peut aussi appliquer la méthode d'acceptation-rejet pour simuler la loi normale. Pour ce faire, on reproduit la même méthode expliquée ci-dessus. La différence est qu'avec la loi normale, nous avons un support non compact, $\mathbb R$. Alors, nous majorons la fonction densité f(x) en rouge de la loi normale par g(x), la densité de la loi "double exponentielle" en vert qui correspond à une variable exponentielle exp(1) affectée d'un signe + ou -, tiré avec probabilité 0.5.

Grâce à la méthode d'inversion, nous savons simuler des réalisations selon la loi de g(x). Ces réalisations sont bien distribuées sur $\mathbb R$ entier. Pour avoir une réalisation qui suit une loi normale, on commence donc par tirer X qui suit la loi de g(x). Ensuite, on tire son ordonnée Y qui suit la loi $\mathcal{U}(0,g(X))$. Puis on pose une condition, si Y > f(X) alors le point est rejeté, ie on ne le prend pas en compte. En revanche, si $Y \le f(X)$ alors le point est accepté. On garde uniquement sont abscisse X, qui suit alors la loi de f(x).

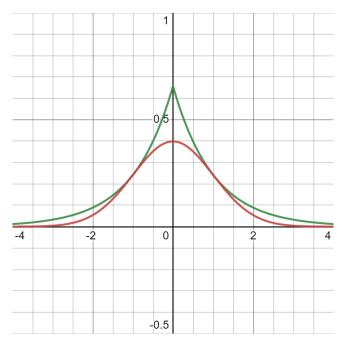


Figure 4: Fonctions densités

On remarque que la fonction majorante en verte est extrêment serré autour de la fonction gaussienne que l'on souhaite à simuler. Plus la différence entre f(x) et g(x), plus le nombre d'itérations qu'il faut pour accepter une valeur. Cela est évident quand on considère que la probabilité d'accepter une valeur proposée est $\frac{f(x)}{cg(x)}$. Quand f(x) est près de cg(x), la probabilité d'être accepté est preque 1. Effectivement, on peut quantifier le nombre d'itérations qu'il faut pour simuler n variables aléatoirement suivant une loi normale centrée réduite.

Moyenne des rejections

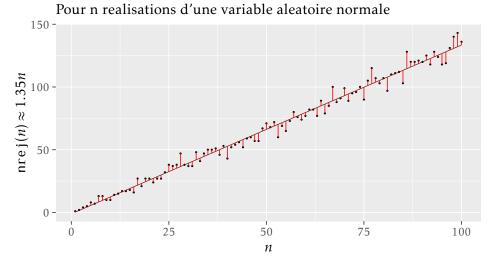


Figure 5

3.2 Box-Muller

La loi normale n'a pas une densité à support compact et on ne connaît pas d'expression simple de l'inverse de sa fonction de répartition. On ne peut donc, théoriquement, employer la méthode de

transformation inversée. On présente ici une méthode qui permet de simuler un couple des variables aléatoires normales, centrées, réduites et indépendantes. On veut simuler $X \sim \mathcal{N}(0,1)$ et $Y \sim \mathcal{N}(0,1)$ indépendantes. On connaît la densité jointe de X et Y :

$$f_{X,Y}(x,y) = \frac{1}{2\pi} \exp(-\frac{x^2 + y^2}{2})$$

On effectue le passage en coordonnées polaires

$$x = \rho \cos(\theta), y = \rho \sin(\theta)$$

et on obtient

$$f_{X,Y}(x,y)dxdy = \frac{1}{2\pi} \exp(-\frac{\rho^2}{2})\rho d\rho d\theta = f_{R,\theta}(\rho,\theta)d\rho d\theta$$

Dans la densité jointe des variable R et θ , on reconnaît $\frac{1}{2\pi}$ = densité de θ qui suit une loi Uniforme sur 0 et 2 π .

 $\rho \exp(-\frac{\rho^2}{2})$ =densité de R. On en déduit la fonction de répartition de R :

$$F_R(\rho) = 1 - exp(-\frac{t^2}{2})$$

On reconnaît une loi exponentielle de paramètres 1/2 pour R^2 . On a donc les lois de R et θ :

$$R^2 \exp(\frac{1}{2}), \theta \ U([0, 2\pi])$$

La méthode consiste donc à tirer deux variables uniforme U_1 et U_2 , puis on insère ces deux variables dans les formule suivante:

$$R = \sqrt[1/2]{-2 \ln U_1}$$

$$\theta = 2\pi U_2$$

et on pose:

$$X = R\cos\theta$$
, $Y = R\sin\theta$

Ces deux variables aléatoires sont indépendantes par construction leur densité jointe est définie comme le produit de leurs densités respectives.

Remarque : Pour simuler $Z \sim N(\mu, \sigma^2)$, on simule $X \sim N(0, 1)$ et on effectue la transformation:

$$Z = \mu + \sigma X$$

Simulation géostatistique

4.1 Motivation

Le monde de simulation classique opère sous l'hypothèse d'indépendance des réalisations successives. C'est-à-dire que le prochain valeur échantillonné n'a aucun rapport avec la valeur précédente. Si on considere qu'une région par exemple d'une montaigne où le terrain dans un rectangle 2 dimensionnel a une certaine altitude, on peut imaginer que les valeurs de l'altitude son aléotoire, mais dans un certain sens leurs quantités sont liées géographiquement. Il existe une structure spatiale sur la région.

La simulation géostatistique plusiers nouveaux conceptes inédit dans la simulation classique. Une idée intégrale de l'étude des processus stochastique spatiale c'est que la configuration des altitudes est considerée une variable régionalisée, ce qui veut dire qu'une certain terrain est une réalisations d'une fonction aléatoire. Comme l'angle d'etude est fondamentalement différent que la simulation classique, on doit approcher la simulation différamment.

5 R shiny

Pour faire la simulation sans passer par du code R, nous avons créé une interface web afin de récupérer les variables simulées. cette interface est implémentée avec la bibliothèque Rshiny, cette bibliothèque est simple à utiliser et permet de créer des sitewebs avec des applications(fonctions) qui s'exécutent en arrière-plan pour faire la simulation.

Nous n'avons pas encore terminé de coder l'application mais dans la version finale l'utilisateur aura le choix de télécharger les variables Aléatoires simulés.

First shiny APP

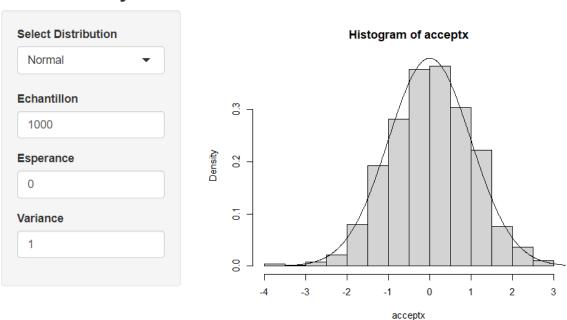


Figure 6: 1,000 réalisations d'une variable aléatoire normale avec espérance 0 et variance 1

First shiny APP

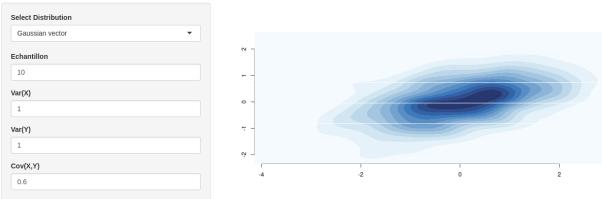


Figure 7: Simulaton d'une loi gaussienne bivarié avec Cov(X, Y) = 0.6 et Var(X) = Var(Y) = 1.

6 Conclusion

Ainsi, nous avons commencé par simuler des variables aléatoires simples en se basant uniquement sur runif (fonction uniforme de R). Nous savons maintenant utilisé les méthodes d'inversion et d'acceptation-

rejet. Nous avons également poussé notre étude en simulation mutlivariée et en spatial. Pour cela nous avons utilisé les méthode de de krigeage et éventuellement nous allons voir si nous pouvons implémenter la méthode spectrale pour simuler des processus gaussiens

7 Ce que nous pourrions amélirorer

7.1 Vitesse

Les boucles en R sont péniblement lentes comparé aux autre languages compilés comme le C. Donc, la plupart de nos algorithmes implémentés sont centaines des fois plus lentes que les fonctions de base en R telles que runif, rexp, etc. Si on avait plus de temps, on aurait aimé implémenter les fonctions en C en utilisant le package Rcpp qui permet d'écrire notre propre code en C/C++ à executer sous R.

8 Réflexions

Ce projet d'initiation a été une véritable découverte pour moi, puisque j'ai appris à utiliser de nouveaux langages de programmation, R et Rshiny. De plus, j'ai découvert la simulation de variables aléatoires multivariées qui sont utiles lorsque l'on veut simuler certains phénomènes physiques.

Samson

J'ai acquis de nombreuse compétence en informatique grâce à ce projet. J'ai appris à utiliser Github en projet, le logiciel R et Rshiny. J'ai compris les notions d'aléatoire et pseudo-aléatoire.

Pauline

J'ai approfindi mes connaissances autour la génération des variables aléatoires qui est indispensable dans le domaine de processus stochastique ou des nombreuses phenomènes phsyiques sont modélisé par des fonctions aléatoires. J'ai eu ma première rencontre avec la simulation conditionnelle et j'ai pu découvrir des nouveaux outils mathématiques utilisés en géostatistique tel que le variogram, la méthode spectrale, et le krigeage.

Evan