



UNIVERSITE KASDI MERBAH  
OUARGLA

Faculté des Mathématiques et des Sciences de la  
Matière



DEPARTEMENT DE MATHEMATIQUES

MASTER

Spécialité : Mathématiques

Option : Probabilités et statistique

Par : BELKHERFI Brahim

Thème

# Modélisation Stochastique du problème des collisions de particules d'un gaz avec une surface

Soutenu publiquement le : 01/10/2020

Devant le jury composé de :

Mr. MEFLAH Mebrouk	M.C.A Université KASDI Merbah-Ouargla	Président
Mr. BOUSAADA Abdelmalek	M.A.A Université KASDI Merbah-Ouargla	Examineur
Mr. AGTI Mohamed	M.A.A Université KASDI Merbah-Ouargla	Examineur
Mr. KHELFAOUI Fethi	Professeur Université KASDI Merbah-Ouargla	Rapporteur

# Table des matières

<b>Dédication</b>	<b>4</b>
<b>Remerciement</b>	<b>5</b>
<b>Notations</b>	<b>6</b>
0.1 Problématique . . . . .	8
0.2 Contexte . . . . .	8
0.3 Introduction générale . . . . .	10
<b>1 Introduction à la physique des plasmas collisionnels</b>	<b>11</b>
1.1 Approche macroscopique . . . . .	11
1.1.1 Définition et nature essentielle du plasma . . . . .	11
1.2 Le phénomène des collisions . . . . .	12
1.2.1 Lois de conservation . . . . .	12
1.2.2 Collisions élastiques . . . . .	13
1.2.3 Collisions inélastiques . . . . .	14
<b>2 Outils de modélisation mathématiques</b>	<b>15</b>
2.1 Processus aléatoire . . . . .	15
2.2 Le mouvement Brownien : Processus à accroissements indépendants . . . . .	16
2.2.1 Quelques repères historiques . . . . .	17
2.2.2 Définition, premières propriétés . . . . .	17
2.2.3 Propriétés immédiates . . . . .	18
2.3 Equations différentielles stochastiques . . . . .	19
2.3.1 L'équation de Langevin . . . . .	19
2.3.2 Etude des EDS . . . . .	20
2.3.3 Solutions fortes d'une EDS . . . . .	21
2.3.4 Le générateur de diffusion d'Itô . . . . .	22
2.4 Processus de Markov et diffusion . . . . .	23
2.4.1 Caractère Markovien . . . . .	23
2.4.2 Temps d'arrêt et propriété de Markov forte . . . . .	23
2.4.3 Arrêt optimal . . . . .	24
2.5 Loi d'une chaîne de Markov . . . . .	24
<b>3 Modélisation stochastique du problème</b>	<b>26</b>
3.1 Introduction . . . . .	26
3.2 Collision et arrêt optimal . . . . .	26
3.2.1 L'équation de Langevin . . . . .	27
3.2.2 Particules en collision . . . . .	27

3.2.3	Détermination de la distribution des vitesses . . . . .	28
3.2.4	Détermination de l'apport d'énergie . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Simulation par la méthode de Monte-Carlo</b>	<b>29</b>
4.1	Introduction . . . . .	29
4.2	Règles générales pour les méthodes de simulation numérique . . . . .	30
4.2.1	Définition du phénomène physique et hypothèse principale . . . . .	30
4.2.2	Définition du modèle mathématique . . . . .	30
4.2.3	Elaboration d'un code de simulation . . . . .	30
4.3	Les méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov (MCMC) . . . . .	31
4.3.1	Principe du modèle MCMC . . . . .	31
	<b>Bibliographie</b>	<b>31</b>

# Table des figures

1	à gauche : La collision (transition) de la particule avec la surface, à droite la distribution de la vitesse de particule (4 gaz rares). . . . .	9
1.1	À gauche : un processus de marche aléatoire des particules de gaz, à droite : Distribution Maxwellienne $M[\rho, u, T_p]$ de la vitesse (vue 1D) . . . . .	11
1.2	Collision de deux particules (choc) . . . . .	13
1.3	Collision frontale unidimensionnelle . . . . .	14
1.4	Collision inélastique (CHOC MOU) . . . . .	14
2.1	Mouvement Brownien d'une particule : À gauche : mouvement aléatoire, au centre : les pressions moléculaires sur différentes surfaces de la particule qui provoquent le mouvement. . . . .	16
2.2	Modèle de Langevin : Simulation du mouvement brownien d'une particule dont la vitesse est une diffusion, à savoir le processus d'Ornstein-Uhlenbeck de dimension 2[8].	16

# Dédicaces

**Je dédie ce mémoire :**

- *à qui étaient la raison de mon existence dans la vie, mes PARENTS,*
- *à mon encadreur le défunt Pr. Aissa Baheddi qu 'Allah le Tout Puissant lui accorde sa miséricorde et l'accepte au sein de son vaste Paradis,*
- *à toute personne ayant contribué de près ou de loin à mon devenir,*
- *à tous/toutes mes collègues.*



# Remerciement

*Grand MERCI à toutes les personnes qui ont permis ce mémoire.*

# Notations

- $e$  Valeur absolue de la charge élémentaire (électron)
- $\mathcal{S}$  Système mécanique (formé de l'ensemble de particules)
- $\mathcal{E}_c(\mathcal{S})$  L'énergie cinétique macroscopique du système,
- $\mathcal{E}_p^{\text{int}}(\mathcal{S})$  L'énergie ponctuelle d'interaction entre les particules
- $U_i$  L'énergie interne de chaque particule.
- $Q$  Quantité d'énergie
- $N_1, N_2$  Nombre de particules avant, et après la collision
- $m_i, m_e$  Masse de la particule (ion/électron)
- $V_i, V_e$  Vitesse de la particule (ion/électron)
- $\omega$  Vitesse relative microscopique de la particule
- $f(\omega)$  Fonction de distribution de la vitesse microscopique de la particule
- $f_{pe}, f_{pi}$  Fréquence des électrons, des ions du plasma
- $E_{Tot}$  Densité volumique d'énergie totale
- $T_s$  Température de la surface
- $T_p$  Température de la particule
- $u$  Vitesse d'une particule relativement à la vitesse moyenne des particules
- $v_{th}$  Vitesse la plus probable d'une distribution de MAXWELL-BOLTZMANN
- $\rho$  Densité de charges
- $k_B$  Constante de Boltzmann
- $\Omega$  L'espace des épreuves
- $\mathbb{P}$  Mesure de probabilité
- $B_t$  Mouvement brownien
- $W_t$  Processus de Wiener
- $\mathcal{F}_t$  Tribu ou  $\sigma$ -algèbre
- $\mathcal{F}$  Filtration
- $\tau$  Temps d'arrêt
- $\tau^*$  Temps d'arrêt optimal
- $X_t$  Une réalisation du processus au temps  $t$
- $V^N$  Moyenne optimale de particules ayant atteint la surface

- E L'ensemble des états
- T L'espace des paramètres
- $\mu_n$  Mesure de probabilité attribué à un état pour une chaîne de Markov

### **CONSTANTES PHYSIQUES**

- Masse de l'électron  $m_e = 9,10938 \times 10^{-31} kg$
- Valeur absolue de la charge de l'électron  $e = 1,60219 \times 10^{-19} C$
- Constante de BOLTZMANN  $k_B = 1,38066 \times 10^{-23} JK^{-1}$



## 0.1 Problématique

Dans une étude récente en physique, la connaissance avec précision des conditions aux limites sur un espèce de particules(ion/électron) d'un gaz, en mouvement brownien, constitue une difficulté majeure. Il s'agit de déterminer l'apport d'énergie (en moins ou en plus) après des collisions avec une surface ayant une température donnée.

Ainsi, avant et après la collision, les particules se déplacent en ligne droite avec des vitesses uniformes. On notera  $\vec{v}_i$  la vitesse d'une particule avant le choc et  $\vec{v}_i'$  celle après.

La problématique est la suivante : compte tenu de la distribution des vitesses  $\vec{v}_i$  peut-on déduire quelques informations sur les vitesses  $\vec{v}_i'$  malgré l'absence de détails concernant l'interaction lors du choc ? Réciproquement, quelle information nous apporte la mesure des vitesses finales  $\vec{v}_i'$  ?

## 0.2 Contexte

Dans cette étude mathématique, on se propose d'introduire un processus stochastique pour modéliser un phénomène physique. Il s'agit d'un traitement microscopique mais macroscopique.

Notre réflexion repose sur le fait que les particules d'un gaz en mouvement brownien, seront repérées par les observations instantanées d'un processus markovien (à accroissements indépendants tout en négligeant l'inertie de la particule qui reste la principale critique de cette approche) et que la position de la particule au futur ne dépend que celle à l'instant  $t$ , donc une chaîne de Markov ou plus explicitement, la diffusion  $(X_t, t \geq 0)$ .

Alors on s'intéresse à calculer la probabilité qu'une particule à l'instant  $t$  ayant une température  $T_p(t)$  atteigne une surface  $S$ , c'est à dire quand une collision avec la surface aura lieu, et à saisir un temps d'arrêt  $\tau$  (le premier instant d'atteindre la surface de collision) et  $X_t$  sera la solution obéissant à l'EDS ayant la forme de diffusion de Itô pour tout instant  $t \geq 0$ .

Ensuite, on s'intéresse à la température de la particule qui est la variable aléatoire qu'on doit déterminer sa valeur au temps d'arrêt  $\tau$ , après la collision soit  $T_p(\tau)$ . Ainsi la variation de la température (i.e l'énergie interne acquise) sera défini formellement pour chaque particule par :

$$\Delta T_p = T_p(t + \Delta t) - T_p(t)$$

La somme des variations de température des particules repérés en collision avec la surface représente ainsi l'apport énergétique en moins ou en plus du flot de particules.

En d'autres mots, on cherche un temps d'arrêt optimale qui correspond à l'instant du choc d'un nombre important de particules avec la surface, et du coup on calcule la somme des variations de leur énergie après la collision qui représente ainsi l'apport d'énergie en question.

Notons aussi que les vitesses des particules à l'état infini (ou initial) ont une distribution de Maxwell-Boltzmann. Quelle sera la distribution des vitesses sur la surface de collision, sachant que la vitesse de la particule dépend étroitement de la température variée de la particule ?

# Conditions initiales

Initialement, à noter que les particules du gaz se déplacent avec des vitesses identiquement distribuées suivant la distribution de MAXWELL-BOLTZMANN (Gaussienne) des vitesses microscopiques  $w$  des particules (cf. Figure 1). Pour les électrons, dans le cas d'une distribution isotrope, nous avons :

$$f(w) = \left(\frac{m_e}{2\pi K_B T_p}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_e w^2}{2\pi K_B T_p}\right) \text{ ou encore } f(w) = A \exp\left(-\frac{m_e w^2}{2\pi K_B T_p}\right)$$

où  $A$  est une constante de normalisation,  $K_B$  est la constante de BOLTZMANN,  $m_e$  la masse des électrons, la température  $T_p$  étant exprimée en kelvin détermine la largeur de la distribution. En notant que  $v_{th}$  la vitesse la plus probable des particules d'une distribution Maxwellienne (Gaussienne), est donnée par :

$$v_{th} = \left(\frac{2K_B T_p}{m_e}\right)^{1/2}$$

On peut écrire la densité sous la forme plus simplifiée suivante :

$$f(w) = \frac{\pi^{-3/2}}{v_{th}^3} \exp\left(-\frac{w^2}{v_{th}^2}\right)$$

**Remarque 0.2.1** Une condition suffisante pour que la distribution des vitesses des particules soit Maxwellienne est que le plasma soit en équilibre thermodynamique.

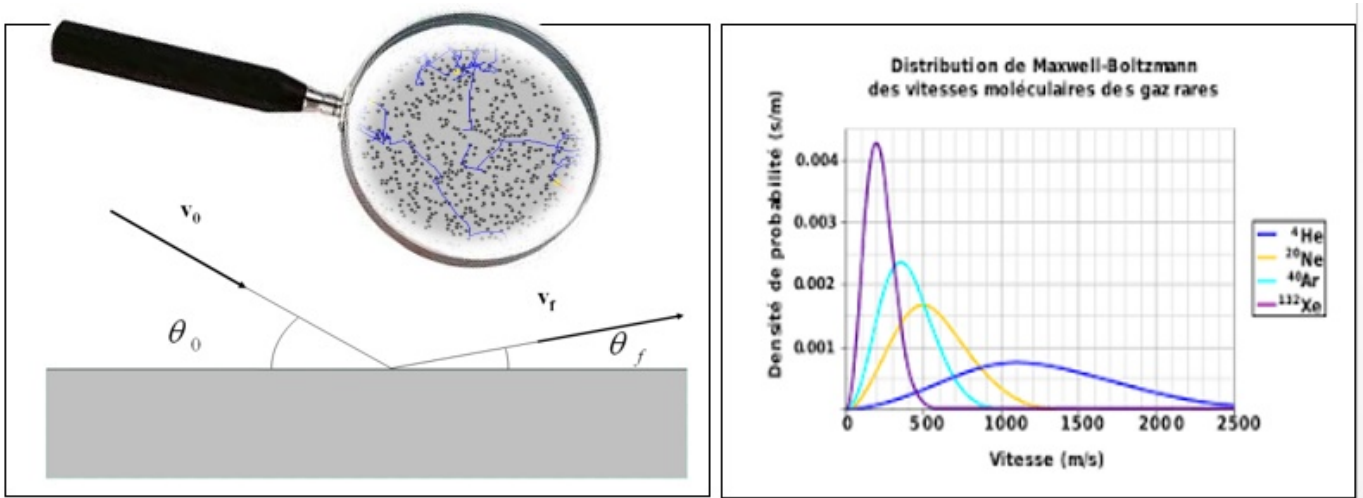


FIGURE 1 – à gauche : La collision (transition) de la particule avec la surface, à droite la distribution de la vitesse de particule (4 gaz rares).

où  $V_0$  et  $V_f$  sont les vitesses de la particule avant et après la collision respectivement, et  $\Theta_0$  et  $\Theta_f$  appelés les angles entre l'impulsion et la surface, avant et après la transition. De plus la distribution de Maxwell-Boltzmann des vitesses moléculaires des gaz rares, est gaussienne pour les quatres types de gaz.

## 0.3 Introduction générale

Nous abordons cette étude par un état de l'art sur la théorie de la physique des plasmas collisionnels, notamment les lois de conservation de l'énergie cinétique, en spécifiant les deux cas de figure, quand il s'agit des collisions élastiques et/ou inélastiques de particules.

Ensuite nous introduisons une théorie fondamentale et des généralités portant sur les processus aléatoires, le processus markovien, le processus de diffusion et ses applications.

Enfin nous entamons le vif du sujet par la modélisation du problème en question, voire l'application et la simulation de la solution.

### Organisation du mémoire

Le présent manuscrit est structuré de la manière suivante :

- *Chapitre 1* : « Introduction à la physique des plasmas collisionnels ».

L'objet principale de ce chapitre est de présenter un état de l'art, ainsi on définit le phénomène de collisions, avant d'exposer ensuite les lois de conservations de l'énergie. Dans le cas de collisions élastiques où la quantité d'énergie peut être préservée après la collision. Dans le cas de collisions inélastiques, ce n'est pas le cas, car la quantité d'énergie avant diffère à celle après la collision, on parle alors de l'énergie libérée ou dissipée.

- *Chapitre 2* : « Outils de modélisation mathématiques ».

Dans la même dynamique, ce chapitre fait l'objet d'un exposé des outils mathématiques, essentielles à la modélisation de notre problématique. En premier lieu, nous définissons le mouvement brownien comme un processus aléatoire à accroissements indépendants et stationnaire en unité de temps. Ensuite nous enchaînons sur les chaînes de Markov et le processus de diffusion et quelques notions fondamentales, notamment la notion de temps d'arrêt pour processus markovien adapté à une filtration, et l'arrêt optimale. Les équations différentielles stochastiques (EDS) en tant qu'outil de modélisation font part de ce chapitre, notamment l'équation de Langevin (1908) modélisant la composante de la vitesse de particules. Puis nous exposons le théorème de Chapman-Kolmogorov qui permet de déterminer la loi d'une chaîne de Markov initialement distribué selon une mesure de probabilité donnée.

- *Chapitre 3* : « Modélisation stochastique du problème ».

Ce chapitre est la pierre de socle, de notre étude. Nous traitons le problème des collisions de particules avec la surface en commençant par modéliser le recensement des particules collés instantanément avec la surface de collision, en introduisant un processus Markovien pour résoudre un problème d'arrêt optimale qui correspond à l'évaluation du nombre moyenne de particules qui peuvent atteindre la surface de collision durant un horizon fini  $N$ . Ainsi la composante de la vitesse (supposée initialement Maxwellienne) de ces particules est modélisée par l'équation de Langevin dont on connaît la solution. Nous définissons une chaîne de Markov, puis le théorème de Chapman-Kolmogorov s'applique, afin de déterminer la distribution après collision. Dans cette optique nous procédons à la détermination de l'apport d'énergie.

- *Chapitre 4* : « Simulation : Méthode de Monté-carlo par une chaîne de Markov (MCMC) ».

Enfin dans le dernier chapitre nous procédons à la simulation de l'approche répondant à la problématique. La méthode de Monté-carlo par une chaîne de Markov ou MCMC pour Markov Chain Monté-Carlo (en anglais) est une méthode souvent utilisée pour évaluer la loi d'une chaîne de Markov puis elle permet de déterminer une espérance.

# Introduction à la physique des plasmas collisionnels

Commençons tout d'abord par introduire le contexte de notre problématique en décrivant succinctement les éléments et les acteurs du problème, puis nous adoptons l'approche adéquate.

## 1.1 Approche macroscopique

Historiquement, le phénomène de diffusion fut abordé de façon phénoménologique par une description macroscopique. C'est cette approche que nous suivons ici.

### 1.1.1 Définition et nature essentielle du plasma

Un plasma est un milieu composé d'électrons et d'ions, libres de se mouvoir dans toutes les directions de l'espace; ce milieu gazeux se distingue d'un gaz classique, composé exclusivement de particules électriquement neutres, par la nature de l'interaction qui existe entre particules chargées[1].

Maxwell a montré au *XIX<sup>e</sup>* siècle que la distribution de la vitesse de particules, la plus probable est une fonction gaussienne centrée sur  $u$  et d'écart type  $\sqrt{RT_p}$ . Sa notation et sa définition sont :

$$M[\rho, u, T_p](v) = \frac{\rho}{(2\pi RT_p)^{3/2}} \exp\left(\frac{-|v-u|^2}{2RT_p}\right)$$

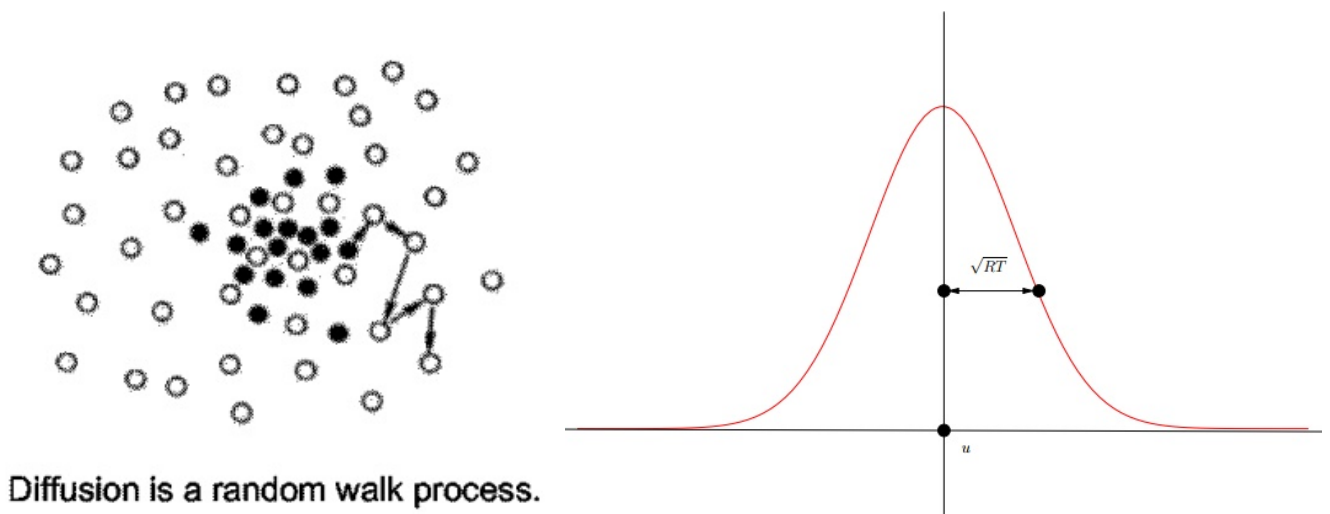


FIGURE 1.1 – A gauche : un processus de marche aléatoire des particules de gaz, à droite : Distribution Maxwellienne  $M[\rho, u, T_p]$  de la vitesse (vue 1D)

Cette fonction de distribution est appelée distribution Maxwellienne (cf. Figure 1.1). Ce n'est rien d'autre qu'une distribution gaussienne (aussi appelée loi normale) centrée sur  $u$  et d'écart type  $\sqrt{RT_p}$ , pour un gaz ayant une densité de masse  $\rho$ , et une vitesse  $u$  et une température  $T_p$ .

On démontre facilement que les moments de la maxwellienne  $M[\rho, u, T_p]$  sont bien  $\rho$ , et  $\rho u$ , et que l'énergie total  $E_{Tot} = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{3}{2}\rho RT_p$ . Il suffit de décomposer l'intégrale en produit d'intégrales sur  $\mathbb{R}$  et en utilisant la relation  $\int_{\mathbb{R}} \exp(-\frac{s^2}{2}) ds = \sqrt{2\pi}$ .

## 1.2 Le phénomène des collisions

Par définition, une collision entre particules correspond au changement petit mais brusque du vecteur vitesse, provoquant le saut de ces particules d'une orbite gyro-magnétique à une autre, et à un déplacement d'ensemble des centre-guides. Après un nombre suffisant de collisions, les particules se retrouvent à des distances significatives de leur position initiale[2].

### 1.2.1 Lois de conservation

Nous abordons dans cette section les processus de collision qui font intervenir deux particules ou objets macroscopiques. Nous verrons comment, malgré l'absence d'information sur l'interaction durant la collision, il nous est possible de décrire complètement ou partiellement l'état du système après la collision si on le connaît avant le choc.

Il existe des situations dans lesquelles des corps matériels interagissent entre eux seulement lorsqu'ils sont très proches. Par ailleurs, il arrive souvent que cette interaction soit difficile à expliciter.

Dans ce cas, le point de vue le plus simple consiste à dire que les particules subissent un choc : on suppose alors qu'ils n'interagissent pas avant ni après et que l'interaction se produit sur une durée très courte.

**Définition 1.2.1** *On dit qu'il y a collision ou choc entre deux ou plusieurs particules quand ces objets subissent une interaction mutuelle de courte durée et de courte portée. Le choc est localisé dans le temps et l'espace. En règle générale, les forces d'interaction sont négligeables quand les particules sont suffisamment éloignées. On peut donc distinguer un avant et un après la collision.*

**Remarque 1.2.2** *Contrairement à l'usage courant du terme, une collision ici n'implique pas forcément qu'il y ait un impact ! Ainsi, le problème d'une comète qui passerait au voisinage du Soleil peut être vu comme une collision.*

Malgré notre connaissance partielle du problème, on peut obtenir certaines informations grâce aux lois de conservation et/ou de symétrie. Désignons par  $\mathcal{S}$  le système mécanique formé par l'ensemble des particules. On considère ce système isolé de l'extérieur ( $\vec{F}^{\text{ext}} = \vec{0}$ ) Enfin, l'analyse est effectuée dans un référentiel galiléen.

#### Conservation de la quantité de mouvement du système

D'après le théorème du centre d'inertie on a :  $\frac{d\vec{p}_{\mathcal{S}}}{dt} = \vec{F}^{\text{ext}} = \vec{0}$  La quantité de mouvement du système se conserve donc.

$$\vec{p}_{\mathcal{S}}^{\text{avant}} = \vec{p}_{\mathcal{S}}^{\text{après}} \quad (1.1)$$

#### Conservation de l'énergie

Si les forces d'interaction dérivent d'une énergie potentielle d'interaction  $\mathcal{E}_p^{\text{int}}$ , alors l'énergie totale du système s'écrit :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_c(\mathcal{S}) + \mathcal{E}_p^{\text{int}}(\mathcal{S}) + \sum_{\text{particules}} U_i$$

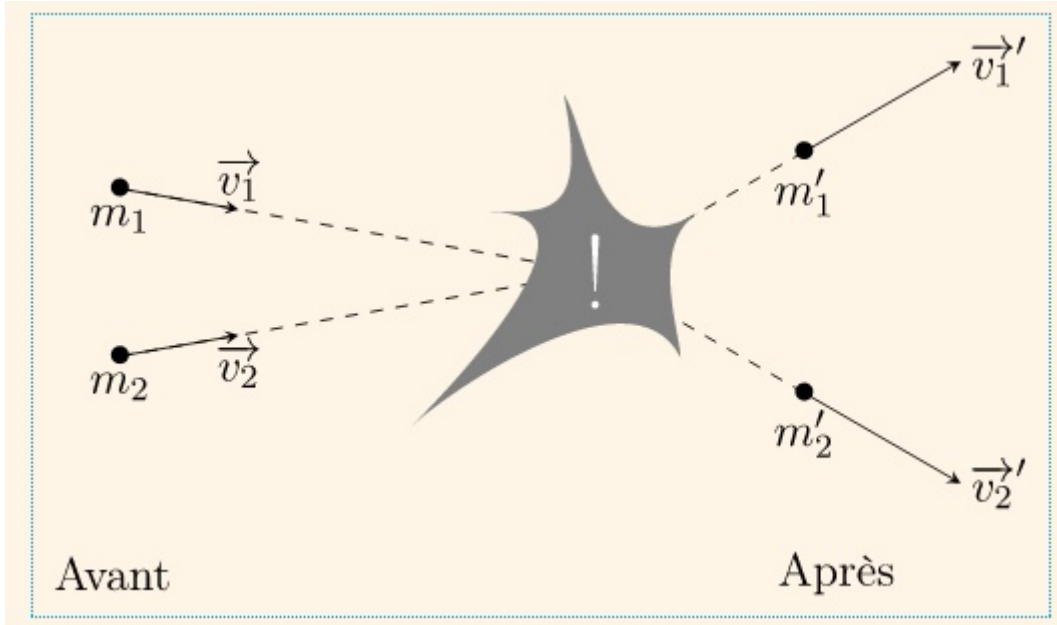


FIGURE 1.2 – Collision de deux particules (choc)

où  $\mathcal{E}_c(\mathcal{S})$  représente l'énergie cinétique macroscopique du système,  $\mathcal{E}_p^{\text{int}}(\mathcal{S})$  l'énergie d'interaction entre les particules et  $U_i$  l'énergie interne de chaque particule.

Le système étant isolé de l'extérieur, l'énergie totale se conserve. De plus, avant et après le choc, on considère que les particules n'interagissent pas entre elles. On peut donc écrire, si l'on note  $N_1$  le nombre de particules avant le choc et  $N_2$  celui après le choc :

**Conservation de l'énergie**

$$\left[ \mathcal{E}_c(\mathcal{S}) + \sum_{i=1}^{N_1} U_i \right]^{\text{avant}} = \left[ \mathcal{E}_c(\mathcal{S}) + \sum_{i=1}^{N_2} U_i \right]^{\text{après}} \quad (1.2)$$

Dans la suite on se limite aux collisions mobilisant seulement deux points matériels.

## 1.2.2 Collisions élastiques

**Définition 1.2.3** *On dit qu'il y a collision élastique lorsque le nombre de particules reste constant et que l'énergie interne de chaque particule reste inchangée avant et après le choc. En d'autres termes, les particules ne se déforment pas ni ne changent de nature (cf. Figure 1.3).*

Citons quelques exemples :

- \* Collision entre boules de pétanque (boules dures indéformables) ;
- \* Diffusion de Rutherford (diffusion d'un noyau  ${}^4_2\text{He}^{2+}$  par un noyau positif).

On peut vérifier que l'énergie cinétique perdue par le projectile vaut :

$$Q = \mathcal{E}'_{c1} - \mathcal{E}_{c1} = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \mathcal{E}_{c1} \quad (1.3)$$

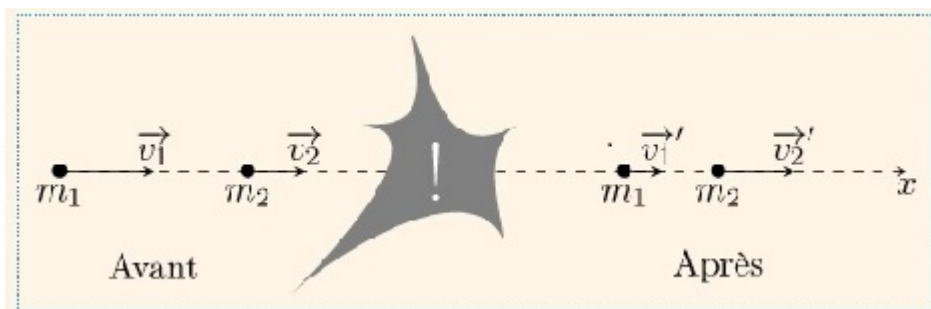


FIGURE 1.3 – Collision frontale unidimensionnelle

### 1.2.3 Collisions inélastiques

**Définition 1.2.4** On dit qu'une collision est inélastique lorsqu'une partie de l'énergie cinétique initiale du système s'est transformée en d'autres formes d'énergie. La collision s'accompagne alors d'une variation d'énergie interne et/ou d'une modification du nombre de particules, certaines pouvant être créées par fragmentation ou par équivalence masse-énergie (cf. Figure 1.4).

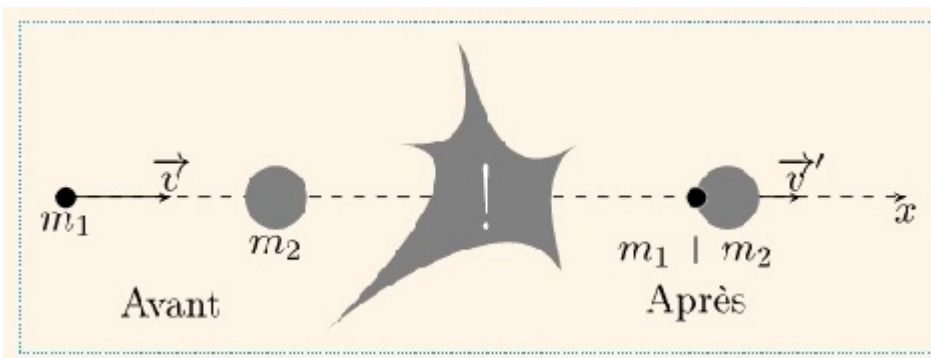


FIGURE 1.4 – Collision inélastique (CHOC MOU)

Les exemples sont nombreux :

*bullet* Lorsqu'on laisse tomber une boule en pâte à modeler, celle-ci ne rebondit pas : toute l'énergie cinétique acquise par la boule avant l'impact est convertie en énergie interne d'où une déformation et un échauffement du projectile.

*bullet* Les réactions chimiques sont en fait le résultat d'une ou plusieurs collisions inélastiques. Par exemple, le processus élémentaire bi-moléculaire  $A+B \rightarrow C+D$  est un choc inélastique puisque les particules après la collision sont différentes des particules avant.

*bullet* Les réactions nucléaires (désintégration, fusion et fission) sont également des processus inélastiques. En général, ces réactions dégagent une énergie considérable.

Le caractère inélastique de la collision est mesurée par la quantité d'énergie :

$$Q = \mathcal{E}_c(S)^{\text{après}} - \mathcal{E}_c(S)^{\text{avant}} = \left[ \sum_{i=1..N_2} U_i \right]^{\text{avant}} - \left[ \sum_{i=1..N_1} U_i \right]^{\text{après}} \quad (1.4)$$

De l'énergie est libérée si  $Q > 0$  ou de l'énergie dissipée si  $Q < 0$ .

# Outils de modélisation mathématiques

## 2.1 Processus aléatoire

Un processus aléatoire est un phénomène dépendant du hasard et d'un paramètre[8]. Ce paramètre peut être le temps(discret ou continu), une coordonnée spatiale ou toute autre variable.

Donc si  $T$  est l'espace des paramètres,  $\Omega$  l'espace des épreuves et  $E$  l'espace d'état du phénomène étudié, un processus aléatoire est une application telle que :  $(t, \omega) \rightarrow X(t, \omega)$  de  $T \times \Omega$  dans  $E$ .

Les principaux domaines d'application sont les suivants :

- L'économie (prévisions) ;
- Les transports et le trafic ;
- Les sciences de l'environnement ;
- Les théories de l'information, du filtrage et de la commande optimale.
- La dynamique des structures sous sollicitations aléatoires ;
- La morphologie mathématique.

**Définition 2.1.1** (*Processus stochastique*) *Un processus stochastique  $X = (X_t)_{t \in T}$  est une famille de variables aléatoires  $X_t$  indexée par un ensemble  $T$ .*

*En général  $T = \mathbb{R}$  ou  $\mathbb{R}_+$  et on considère que le processus est indexé par le temps  $t$ .*

- *Si  $T$  est un ensemble fini, le processus est un vecteur aléatoire.*
- *Si  $T = \mathbb{N}$  alors le processus est une suite de variables aléatoires.*
- *Plus généralement quand  $T \subset \mathbb{Z}$ , le processus est dit discret.*
- *Pour  $T \subset \mathbb{R}^d$ , on parle de champ aléatoire (drap quand  $d = 2$ ).*

*Un processus dépend de deux paramètres :  $X_t(\omega)$  dépend de  $t$  (en général le temps) et de l'aléatoire  $\omega \in \Omega$  :*

- *Pour  $t \in T$  fixé,  $\omega \in \Omega \mapsto X_t(\omega)$  est une variable aléatoire sur l'espace de probabilité  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$  ;*
- *Pour  $\omega \in \Omega$  fixé,  $t \in T \mapsto X_t(\omega)$  est une fonction à valeurs réelles, appelée trajectoire du processus. C'est un enjeu que de savoir si un processus admet des trajectoires mesurables, continues, dérivables ou encore plus régulières.*

*Dans la suite, sauf mention contraire, on prendra  $T = \mathbb{R}_+$  ou  $[0, 1]$ .*



## 2.2 Le mouvement Brownien : Processus à accroissements indépendants

Historiquement, le mouvement brownien a été exhibé pour représenter des mouvements qui évoluent au cours du temps de façon particulièrement désordonnée, par exemple en physique pour représenter des particules microscopiques soumises aux multiples chocs de leur environnement ou en finance pour représenter des cours de bourses très volatiles. Le mouvement brownien joue un rôle central dans la théorie des processus stochastiques (comme la loi normale standard  $\mathcal{N}(0; 1)$  pour les lois de probabilités sur  $\mathbb{R}$ ). Il apparaît dans de nombreuses situations aussi bien théoriques qu'applicatives et il offre un cadre assez simple où de nombreux calculs peuvent être menés.

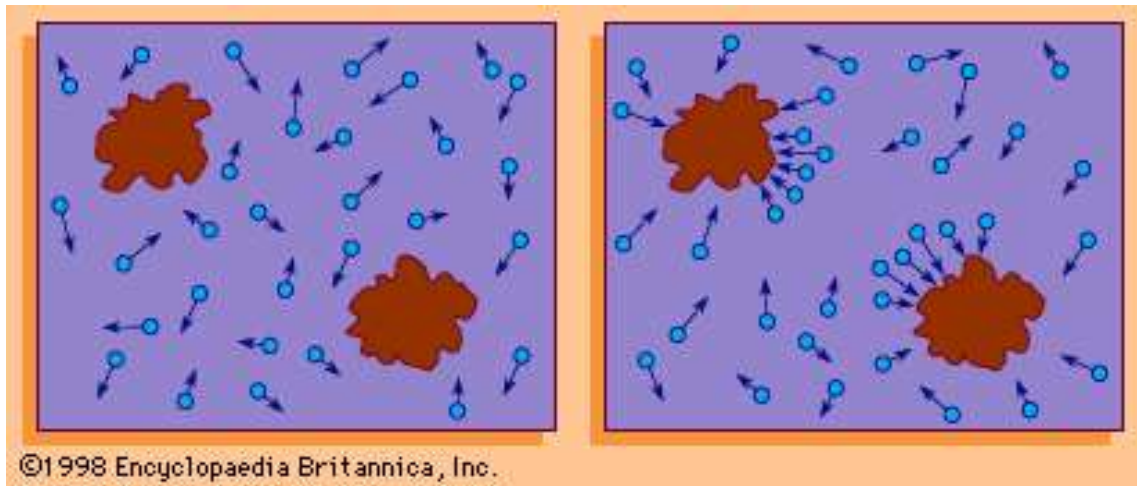


FIGURE 2.1 – Mouvement Brownien d’une particule : À gauche : mouvement aléatoire, au centre : les pressions moléculaires sur différentes surfaces de la particule qui provoquent le mouvement.

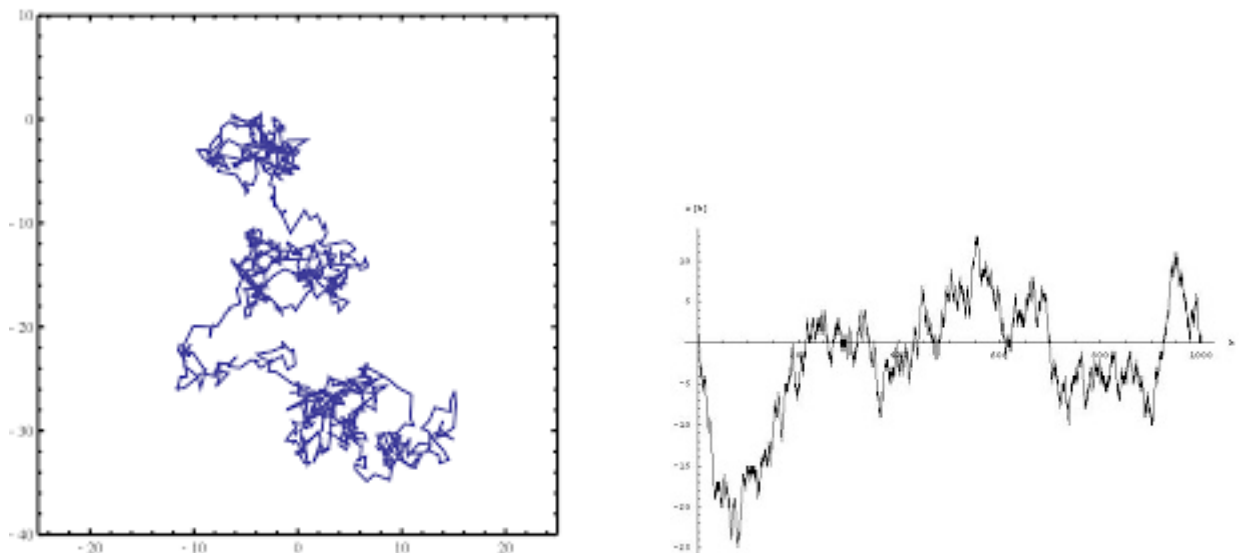


FIGURE 2.2 – Modèle de Langevin : Simulation du mouvement brownien d’une particule dont la vitesse est une diffusion, à savoir le processus d’Ornstein-Uhlenbeck de dimension 2[8].

### 2.2.1 Quelques repères historiques

- **1827 Robert Brown botaniste écossais** Observe le mouvement erratique de petites particules de pollen immergées dans de l'eau. Cette « marche aléatoire », autrement appelé par le nom de son observateur « mouvement brownien », servira de modèle pour la diffusion.
- **1830 Thomas Graham, chimiste écossais** En étudiant la miscibilité des gaz, il a établi que des gaz de nature différente, lorsque mis en contact, ne s'arrangent pas en fonction de leur densité, mais diffusent spontanément entre eux, et restent dans l'état intime de mélange indéfiniment.
- **1855 Adolf Fick, physiologiste allemand** Ce physiologiste s'intéresse à la physique médicale. On lui doit les premières lentilles de contact en 1887. Il propose des lois phénoménologiques, empiriques, inspirées des lois de Joseph Fourier pour la chaleur (établies en 1822), pour décrire la diffusion dans les fluides.
- **1896 William Chandler Roberts-Austen,**  
Métallurgiste connu pour ses recherches sur les propriétés physiques des métaux et de leurs alliages. L'Austénite porte son nom en son honneur. Responsable de la monnaie en Grande-Bretagne, accole une plaquette d'or à une plaquette de plomb, fait chauffer le tout et mesure la profondeur de pénétration d'un métal dans l'autre. C'est la première mesure d'un coefficient d'inter-diffusion à l'état solide. Deux citations intéressantes : « Mes études approfondies sur les travaux de Graham font qu'il est mon devoir d'étendre son travail sur la diffusion des liquide au cas des solides » (WC Roberts-Austen, 1896). « Les évidences rassemblées par les métallurgistes sur les mouvements des atomes dans les métaux liquides et solides entretiennent l'espoir des physiologistes qu'il sera possible de mesurer les mouvements atomiques dont dépendent la vitalité et la pensée. »
- **1905 Albert Einstein / 1906 Marian Smoluchowski** Par ses travaux sur la loi stochastique Einstein fait le lien entre le mouvement Brownien et la diffusion, *démontrant ainsi les lois de Fick*. Le coefficient de diffusion est maintenant exprimé à partir des paramètres microscopiques du solide. Indépendamment mais simultanément et par une autre méthode, Marian Smoluchowski parvient au même résultat, appelé aujourd'hui la relation d'Einstein-Smoluchowski. C'est le fondement des théories modernes de la diffusion solide, qui sont aujourd'hui encore l'objet d'attention et de développement dans la communauté scientifique.

### 2.2.2 Définition, premières propriétés

Le caractère très erratique des trajectoires qui caractérise le mouvement brownien est en général associé à l'observation que le phénomène, bien que très désordonné, présente une certaine homogénéité dans le temps, au sens où la date d'origine des observations n'a pas d'importance. Ces propriétés sont reprises dans la définition qui suit.

**Définition 2.2.1 (Mouvement brownien)** *Un mouvement brownien (standard) réel est un processus gaussien centré  $(B_t)_{t \geq 0}$  à trajectoires continues de fonction de covariance  $K(s, t) = \min(s, t) = s \wedge t$  : On l'appelle aussi processus de Wiener.*

L'opérateur  $K(s, t) = \min(s, t)$  est symétrique et de type positif. En effet si  $C : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  est à support borné alors :

$$\begin{aligned}
\sum_{s,t \in R} C(s)C(t)K(s,t) &= \sum_{s,t \in R} C(s)C(t)(s \wedge t) \\
&= \sum_{s,t \in R} C(s)C(t) \int 1_{[0,s]}(x)1_{[0,t]}(x)dx \\
&= \int \sum_{s,t \in R} C(s)C(t)1_{[0,s]}(x)1_{[0,t]}(x)dx \\
&= \int \left( \sum_{t \in R} C(t)1_{[0,t]}(x) \right)^2 dx \geq 0.
\end{aligned}$$

de plus le théorème suivant confirme l'existence d'un processus gaussien de covariance  $K$ .

**Théorème 2.2.2** *Soit  $K$  une fonction symétrique de type positif sur  $T \times T$ . Il existe alors un processus gaussien (centré) dont la fonction de covariance est  $K$ .*

### 2.2.3 Propriétés immédiates

1)  $B_0 = 0$  car la loi de  $B_0$  est  $\mathcal{N}(0,0) = \delta_0$ , la loi dégénérée en 0.

2)  $B_t \rightsquigarrow N(0,t)$  car  $E[B_t] = 0$  et  $Var(B_t) = K(t,t) = t$ .

3)  $(B_t)_{t \geq 0}$  est un processus à accroissements indépendants. En effet soit  $0 \leq t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ , on a  $Cov(B_{t_2} - B_{t_1}, B_{t_4} - B_{t_3}) = 0$  sont donc non corrélées. Comme le vecteur  $(B_{t_2} - B_{t_1}, B_{t_4} - B_{t_3})$  est gaussien,  $(B_{t_2} - B_{t_1})$  et  $(B_{t_4} - B_{t_3})$  sont indépendantes. On justifie de même l'indépendance mutuelle de  $n$  accroissements,  $n \geq 1$ .

4) Si  $s \leq t$ , on a  $B_t - B_s \rightsquigarrow B_{t-s}$ . En effet  $E[B_t - B_s] = E[B_t] - E[B_s] = 0$  et :

$$\begin{aligned}
Var(B_t - B_s) &= Cov(B_t - B_s, B_t - B_s) \\
&= Cov(B_t, B_t) - 2Cov(B_t, B_s) + Cov(B_s, B_s) \\
&= t - 2s + s = t - s.
\end{aligned}$$

Donc  $B_t - B_s \rightsquigarrow \mathcal{N}(0, t - s)$ ,  $B_{t-s} \rightsquigarrow \mathcal{N}(0, t - s)$ .

**Remarque 2.2.3** *Les propriétés 3) et 4) s'énoncent comme suit : le brownien a des accroissements indépendants et stationnaires.*

**Théorème 2.2.4** *Le mouvement brownien est un processus markovien. En outre, on connaît exactement la loi conditionnelle de son futur :*

$$Loi((B_{t_1+u})_{u \geq 0} | B_{t_1} = x) \rightsquigarrow (x + \tilde{B}_u)_{u \geq 0}$$

où  $(\tilde{B}_u)_{u \geq 0}$  suit la loi d'un (autre) mouvement brownien de même variance par unité de temps.

**Théorème 2.2.5** *Pour tout  $t_1 > 0$ ,  $(B_{t_1+u} - B_{t_1})_{u \geq 0}$  suit la même loi que  $(B_u)_{u \geq 0}$  : on dit que le mouvement brownien est à accroissements stationnaires.*

**Théorème 2.2.6** Soit  $B$  un mouvement brownien unidimensionnel. Si  $T$  est un temps d'arrêt borné, alors  $\mathbb{E}(B_T) = B_0$  : on dit que le mouvement brownien vérifie la propriété martingale (globale).

**Corollaire 2.2.7** Soit  $B$  un mouvement brownien unidimensionnel. Pour  $M < \infty$ , notons  $\tau$  le premier instant  $t$  pour lequel  $|B_t| > M$ .

Ce processus définit un temps d'arrêt, notons  $\tilde{B}_t = B_{t \wedge \tau}$  «le mouvement brownien stoppé au temps  $\tau$ ». Alors pour tout temps d'arrêt  $T$  fini presque-sûrement,  $\mathbb{E}(\tilde{B}_T) = B_0$  : on dit que le mouvement brownien vérifie la propriété de martingale locale.

## 2.3 Equations différentielles stochastiques

### 2.3.1 L'équation de Langevin

En 1908, Langevin étudie le mouvement brownien d'une particule dans un fluide[4]. Langevin décrit le mouvement d'une telle particule par l'équation :

$$X'_t = -\alpha X_t + \sigma \zeta_t \quad (2.1)$$

où  $\alpha > 0$  et  $\sigma$  sont des constantes,  $X_t$  représente la composante de la vitesse de la particule suivant l'axe des  $x$ ,  $-\alpha X_t$  représente la force due à la friction dynamique avec le fluide, la constante  $\alpha$  est donnée par la loi de Stokes :  $\alpha = \frac{6\pi a \eta}{m}$ .

où  $a$  est le rayon de la particule,  $m$  sa masse et  $\eta$  la viscosité du fluide. La quantité  $\sigma \zeta_t$  représente la force exercée sur la particule par les chocs avec les molécules du fluide (cf. Figure 2.2),  $\sigma \zeta_t$  varie donc très rapidement et peut être modélisé par le bruit blanc  $\zeta_t$  qui est tel que :

$$W_t = \int_0^t \zeta_s ds \quad (2.2)$$

Langevin fût donc le premier à considérer des équations du type :

$$\begin{cases} X'_t = a(t, X_t) + b(t, X_t)\zeta_t \\ X_{t_0} = C \end{cases} \quad (2.3)$$

Au début des années quarante, Itô développe la notion de l'intégrale stochastique[5] et donne des conditions suffisantes pour l'existence de solutions pour l'équation ((2.3.1)).

En posant dans l'équation (2.3),  $dW_t = \zeta_t dt$ , on obtient :

$$\begin{cases} X'_t = a(t, X_t) + b(t, X_t)dW_t \\ X_{t_0} = C \end{cases} \quad (2.4)$$

D'où la solution sous forme intégrale :

$$X_t = C + \int_{t_0}^t a(s, X_s)ds + \int_{t_0}^t b(s, X_s)dW_s \quad (2.5)$$

La deuxième intégrale ne peut être interprétée comme une intégrale de Riemann Stieltjes car les réalisations du processus de Wiener ne sont pas à variations bornées.

Pour résoudre ce problème, on définit l'intégrale stochastique de Itô et on entend par EDS au sens de Itô une équation de la forme ((2.3.1)).

Le mouvement Brownien est représentée dans l'équation aux moments par le processus de Wiener dont l'accroissement est notée  $dW_t$  (tel que  $dW_t \rightsquigarrow \mathcal{N}(0, dt)$ )

### 2.3.2 Etude des EDS

Dans l'étude des EDS, on s'intéresse plus particulièrement aux questions suivantes :

- Le dimensionnement d'une structure soumise à des actions dynamiques nécessite de connaître les sollicitations excitatrices et le comportement dynamique de la structure sous ces sollicitations
- Quelles sont les conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence et l'unicité de solutions pour l'équation (2.3.1)
- Pour quel type d'équations, les formes explicites de solutions sont obtenues
- Sous quelles conditions, chaque solution est définie pour  $t > 0$  c'est à dire n'échappe pas à l'infini pour t fini ( n'explose pas)
- Quelles sont les classes d'approximations discrètes numériques pour les EDS
- L'étude numérique est basée sur le remplacement du problème continu par un problème discret.

Deux grandes classes d'approximations sont proposées dans la littérature ( voir par exemple [5] et [6]). La première est celle des approximations fortes basées sur la simulation directe des trajectoires de la solution. La seconde s'intéresse à l'approximation de certaines fonctionnelles de la solution, en particulier, l'espérance et l'espérance quadratique ( de second ordre).

Parfois, on peut déterminer explicitement la solution en fonction du processus de Wiener  $W_t$  ou bien calculer certaines caractéristiques probabilistes de la solution telles que l'espérance mathématique ou la densité des probabilités de transition.

Donc en générale une EDS est utilisée pour modéliser un processus de diffusion dont la solution est une martingale.

**Définition 2.3.1** Soit  $(B_t)_{t \geq 0}$  un mouvement brownien à valeur dans  $\mathbb{R}^d$ , et  $H$  une variable aléatoire à valeur dans  $\mathbb{R}^n$  indépendante de  $(B_t)_{t \geq 0}$ . On pose  $\mathcal{F} = \sigma(H, B_s, s \leq t)$

$$X_t = H + \int_0^t \sigma(X_s) dB_s + \int_0^t b(X_s) ds$$

où  $\sigma$  est une application de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}^{n \times d}$  des matrices  $n \times d$  et  $b$  une application de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}^n$ . la solution de cette EDS est un processus  $(X_t)_{t \geq 0}$  adapté à  $F_t$ , à trajectoires continues tel que :

$$\begin{cases} \forall t & E(\int_0^t |\sigma(X_s)|^2 ds) < \infty \\ \forall t & E(\int_0^t |b(X_s)| ds) < \infty \end{cases} \quad (2.6)$$

**Théorème 2.3.2** (Théorème d'Itô (Unicité)) Si les fonction  $\sigma$  et  $b$  sont lipschitziennes :

$$\begin{aligned} \|\sigma(x) - \sigma(y)\| &\leq K_1 \|x - y\| \\ \|b(x) - b(y)\| &\leq K_2 \|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

et si  $H \in L^2$  alors l'EDS en question admet une solution unique.

**Théorème 2.3.3** (Existence) Supposons que les coefficients  $b$  et  $\sigma$  soient globalement lipschitziens et à croissance au plus linéaire

$$\begin{aligned} \|(t, x) - b(t, y)\| + \|\sigma(t, x) - \sigma(t, y)\| &\leq K \|x - y\| \\ \|b(t, x)\|^2 + \|\sigma(t, x)\|^2 &\leq K^2(1 + \|x\|^2) \end{aligned}$$

pour tout  $t \geq 0, x \in \mathbb{R}^d, y \in \mathbb{R}^d$  avec  $K$  constante positive. Supposons aussi que  $\mathbb{E}(\|\xi\|^2) \leq \infty$

Alors il existe un processus adapté et continu  $X$  qui est la solution de l'EDS. De plus pour tout  $T \geq 0$ , il existe une constante  $C = C(K, T)$  telle que  $\mathbb{E}|X_t^2| \leq C(1 + \mathbb{E}\|\xi\|^2)e^{Ct}, 0 \leq t \leq T$ .

### 2.3.3 Solutions fortes d'une EDS

Etant donnée une équation différentielle stochastique (EDS), de la forme :

$$dX_t = f(X_t, t)dt + g(X_t, t)dB_t \quad (2.7)$$

où  $f, g : \mathbb{R} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  sont des fonctions déterministes mesurables. La fonction  $f$  est communément appelée coefficient de dérive, alors que  $g$  est appelée coefficient de diffusion. Nous supposons que :

- Soit  $X_0 \in \mathbb{R}$  est une constante, et alors  $\{\mathcal{F}_t\}_{t \in [0, T]}$  désigne la filtration engendrée par le mouvement Brownien.
- Soit  $X_0 : \Omega \times R \rightarrow \mathbb{R}$  est une variable aléatoire, de carrée intégrable, et indépendante du mouvement Brownien. Dans ce cas,  $\{\mathcal{F}_t\}_{t \in [0, T]}$  désignera la filtration engendrée par le mouvement Brownien et par  $X_0$ .

**Définition 2.3.4** Un processus stochastique  $(X_t, t \in [0, T])$  est appelé une solution forte de l'EDS (2.7) avec condition initiale  $X_0$  si :

- $X_t$  est  $\mathcal{F}_t$ -mesurable pour tout  $t \in [0, T]$  ;
- on a les conditions de régularité  $P \left\{ \int_0^T |f(X_s, s)| ds < \infty \right\} = P \left\{ \int_0^T g(X_s, s)^2 ds < \infty \right\} = 1$  ;
- pour tout  $t \in [0, T]$

$$X_t = X_0 + \int_0^t f(X_s, s)ds + \int_0^t g(X_s, s)dB_s$$

avec probabilité 1.

**Exemple 2.3.5** Processus d'Ornstein-Uhlenbeck

Notons  $V(t)$  la vitesse à l'instant  $t$  de la particule de masse  $m$ . La variation de la quantité de mouvement  $mV(t + \Delta t) - mV(t)$  entre  $t$  et  $t + \Delta t$  est donnée par :

$$m\Delta V = -rV\Delta t + \Delta M \quad (2.8)$$

où :  $-rV$  est la résistance due à la viscosité du fluide et donc  $-rV\Delta t$  la perte de la quantité de mouvement due à la viscosité durant  $\Delta t$  et où  $\Delta M$  est la variation de la quantité de mouvement due aux chocs moléculaires.

Si nous considérons que le transfert de quantité de mouvement dû aux chocs  $\Delta M(t)$  jusqu'au temps  $t$  est tel que :

- $\Delta M = M(t + \Delta t) - M(t)$  est indépendant de  $\sigma(M_s, \quad s \leq t)$  ;
- la loi de  $\Delta M$  ne dépend que de  $\Delta t$  ;
- $M(t)$  est continu ;

Alors nous voyons que nous pouvons représenter  $M(t)$  par un mouvement brownien.

Si de plus nous supposons qu'il n'y a pas de champ de force constant de sorte que  $E[M(t)] = 0$ , on peut poser :  $M(t) = \sigma X_t$  où  $X_t$  est un mouvement brownien normalisé. de sorte que l'équation (2.3.5) s'écrit :

$$m dV(t) = -rV dt - \sigma dX(t) \quad (2.9)$$

dite équation de Langevin, en posant  $V(0) = H$ , l'équation (2.8) admet comme solution :

$$V(t) = \exp(-rt/m) [H + \frac{\sigma}{m} \int_0^t \exp(rs/m) dX(s)]$$

$V(t)$  est un processus gaussien stationnaire appelé un processus d'Ornstein-Uhlenbeck.

### 2.3.4 Le générateur de diffusion d'Itô

Un générateur infinitésimal est un outil de calcul stochastique, utilisé notamment pour les processus de Markov à temps continu.

Dans les chaînes de Markov à temps continu. Soit le processus stochastique  $(X(t), t \geq 0)$  à temps continu et à états discrets. Soit  $\tau_i$  la variable aléatoire désignant le temps que passe le processus à l'état  $i$  avant de passer dans un autre état. Les chaînes de Markov à temps continu sont des processus stochastiques qui doivent (entre autres) vérifier la propriété de non-vieillessement :

$$P[\tau_i > s + t | \tau_i > t] = P[\tau_i > s]$$

Ce qui signifie que le temps qu'il reste à passer dans un état ne dépend pas du temps déjà passé dans cet état.

De cette propriété on peut déduire que dans une chaîne de Markov à temps continu les variables aléatoires  $\tau_i$  suivent des lois exponentielles (car celles-ci sont les seules lois de probabilités continues vérifiant la propriété de non-vieillessement).

On notera  $\mathcal{P}_{ij}(s)$  la probabilité que partant de l'état  $i$  à un instant  $s$ . Les fonctions  $\mathcal{P}_{ij}(s)$  sont appelées fonctions de transition de la chaîne, et ont la propriété, pour tout  $i$  :

$$\sum_{j=0}^{\infty} p_{ij}(t) = 1$$

(c'est-à-dire que l'on doit forcément être dans un des états au temps  $t$ ). Par ailleurs ces fonctions vérifient les équations de Chapman-Kolmogorov continues.

## 2.4 Processus de Markov et diffusion

En physique, la diffusion désigne deux phénomènes distincts (dont les noms anglais diffèrent) :

- Diffusion ou diffraction (en anglais scattering)
- Diffusion des ondes, propagation des ondes (notamment de la lumière) lorsque celles-ci rencontrent un obstacle
- Diffusion des particules, interaction entre deux particules lorsque l'une est projetée sur l'autre et nous s'intéressons plutôt à cette catégorie de diffusion.

Une diffusion est caractérisée par une équation de diffusion avec une dérivée première en temps, et seconde en espace.

### 2.4.1 Caractère Markovien

Le caractère markovien peut s'exprimer de deux façons :

- Soit en disant que l'avenir du processus ne dépend pas de tout le passé mais seulement du présent ;
- Soit en disant que l'avenir et le passé du processus sont conditionnellement indépendants sachant le présent.

**Définition 2.4.1** (*Diffusion d'Itô*). Une diffusion d'Itô homogène dans le temps est un processus stochastique  $(X_t(\omega))_{t \geq 0}$  satisfaisant une équation différentielle stochastique de la forme :

$$dX_t = f(X_t)dt + g(X_t)dB_t, \quad t \geq s > 0, \quad X_s = x \quad (2.10)$$

où  $B_t$  est un mouvement Brownien standard de dimension  $m$ , et le coefficient de dérive  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  et le coefficient de diffusion  $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times m}$  sont tels que l'EDS (2.10), admette une unique solution en tout temps  $t$ .

**Lemme 2.4.2** Les processus  $(X_{s+h}^{s,x})_{h \geq 0}$  et  $(X_h^{0,x})_{h \geq 0}$  ont la même loi.

### 2.4.2 Temps d'arrêt et propriété de Markov forte

Un temps d'arrêt très souvent utilisé est le premier temps d'atteinte d'un sous-ensemble  $A \subset E$  par le processus  $(X_n)_{n \geq 0}$ .

$$T_A = \inf \{n > 0; X_n \in A\}$$

avec éventuellement  $T_A = \infty$  si le sous-ensemble  $A$  n'est jamais atteint. On a alors :

$$1_{(T_A=n)} = 1_{(X_0 \notin A, \dots, X_{n-1} \notin A, X_n \in A)}.$$

Un temps d'arrêt  $T$  permet de stopper un processus  $(X_n)_{n \geq 0}$  à un temps aléatoire dépendant uniquement du passé et du présent : l'évènement  $\{T = n\}$  ne doit pas contenir d'information sur ce qui se passe au-delà du temps  $n$ .

On cherche ici le moment de la collision avec la surface (frontière d'une boule par exemple).

Une conséquence importante de la propriété de Markov est que le processus décalé en temps  $(X_{n+k})_{k \geq 0}$  demeure, conditionnellement à  $(X_n = x)$ , une chaîne de Markov de matrice de transition  $P$  partant de  $x$  au temps 0. Cette propriété reste valable pour des décalages en temps par des temps d'arrêt.



**Théorème 2.4.3** (*Propriété de Markov forte*).

Soit  $(X_n)_{n \geq 0}$  une chaîne de Markov de matrice de transition  $P$  et de loi initiale  $\mu_0$ . On considère  $T$  un temps d'arrêt pour cette chaîne de Markov.

Conditionnellement à  $\{T < \infty\}$  et  $X_T = x$ , le processus décalé en temps  $(X_{T+k})_{k > 0}$  est une chaîne de Markov de matrice de transition  $P$  partant initialement de  $x$ . De plus, toujours conditionnellement à  $\{T < \infty\}$  et  $X_T = x$ , la chaîne de Markov  $(X_{T+k})_{k > 0}$  est indépendante de  $\{X_0, X_1, \dots, X_{T-1}\}$

**Proposition 2.4.4** Soit  $T$  un temps d'arrêt (par rapport à  $(\mathcal{F})$ ), pour tout  $A \in \mathcal{A}$ , on a pour tout loi initiale  $\mu$  :

$$P_\mu[\{(X_T, X_{T+1}, \dots) \in A\} \{T < +\infty\} | \mathcal{F}_T] = \mathbb{P}_{X_T}[A] 1_{[T < +\infty]} \quad (2.11)$$

### 2.4.3 Arrêt optimal

Un arrêt optimale qui par définition le meilleur instant de prendre une décision, en réponse à notre problématique on décide de stopper le processus de diffusion avant un horizon fini  $N$  (1heure ou 2 heures ) quand on recense un nombre important de particules qui ont transité la surface.

Si  $X_n$  représente le nombre de particules qui heurtent la surface alors les filtrations permettent de hiérarchiser l'information, et on supposera que le processus aléatoire  $X = \{X_n, n = 0, \dots, N\}$  est adapté à la filtration  $\mathcal{F} = (\mathcal{F}_n, n \in \mathbb{N})$  où  $\mathcal{F}_n$  contient toute l'information jusqu'au temps  $n$ .

Notre objectif est de construire une stratégie optimale, c'est-à-dire de définir un temps d'arrêt  $\tau$  pour que l'espérance  $\mathbb{E}(X_t)$  soit maximale. Plus précisément, si  $T^N$  représente l'ensemble des  $N$  temps d'arrêt à valeurs dans  $\{0, \dots, N\}$ , on cherche à résoudre le problème d'arrêt optimal :

$$V^N = \sup_{t \in T^N} (\mathbb{E}(X_t))$$

On dira qu'un temps d'arrêt  $\tau^*$  dans  $T^N$  est optimal si  $V^N = \mathbb{E}(X_{\tau^*})$ . Il s'agit d'une stratégie d'arrêt optimal en *horizon fini* car la décision doit être prise avant l'instant  $N$ .

## 2.5 Loi d'une chaîne de Markov

Etant donnée une chaîne de Markov homogène  $(X_n, n > 0)$  sur  $E$  dont la donnée initiale  $X_0$  est choisie aléatoirement sur  $E$  selon la mesure de probabilité  $\mu_0$  qui attribue les probabilités  $(\mu_0(x))_{x \in E}$  aux éléments de  $E$ . On notera :

$$\forall x \in E, \quad P_{\mu_0}(X_0 = x) = \mu_0(x).$$

L'objet du théorème suivant, est de déterminer la distribution de la chaîne de Markov.

**Théorème 2.5.1** (*Chapman-Kolmogorov*).

Soit  $(X_n)_{n > 0}$  une chaîne de Markov sur  $E$  de matrice de transition  $P$  dont la donnée initiale  $X_0$  est distribuée selon la loi  $\mu_0$ . Alors, la probabilité d'observer la trajectoire  $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$  est donnée par :

$$P_{\mu_0}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \mu_0(x_0)P(x_0, x_1)P(x_1, x_2) \dots P(x_{n-1}, x_n) \quad (2.12)$$

La loi  $\mu_n$  de  $X_n$  est déterminée par l'équation de Chapman-Kolmogorov :

$$\forall y \in E, \quad \mu_n(y) = \mu_{n-1}P(y) = \mu_0 P^n(y)$$

Si initialement la chaîne de Markov part de  $X_0 = x$ , alors la distribution initiale est donnée par  $\mu_0(y) = 1_{(y=x)}$ , et (2.12) s'écrit

$$\forall y \in E, \quad P(X_n = y | X_0 = x) = P^n(x, y).$$

Soit  $h$  une fonction bornée de  $E$  dans  $R$ . Si initialement  $X_0 = x$ , l'espérance de  $h(X_n)$  s'écrit :

$$E(h(X_n) | X_0 = x) = P^n(h(x)).$$

**Remarque 2.5.2** On interprète l'équation de Chapman-Kolmogorov en disant que la probabilité d'observer  $X_n$  en  $y$  est la somme des probabilités de toutes les trajectoires possibles de la chaîne de Markov partant de  $x_0$  et arrivant en  $y$  au temps  $n$  :

$$\forall y \in E, \quad \mu_n(y) = \sum_{\{x_0, x_1, \dots, x_n\} \in E^n} \mu_0(x_0) P(x_0, x_1) P(x_1, x_2) \dots P(x_{n-1}, x_n).$$

Réciproquement, on remarquera que tout processus  $(X_n)_{n>0}$  dont la distribution satisfait (2.12) pour tout  $n > 0$  est une chaîne de Markov.

# Modélisation stochastique du problème

## 3.1 Introduction

Tout d'abord on doit préciser clairement les conditions initiales liées aux particules en diffusion. Alors nous supposons que les collisions sont inélastiques pour assurer un apport d'énergie, car dans le cas des collisions élastiques les grandeurs sont invariants comme illustré dans l'équation (1.2.1) et d'autre part, la connaissance de la température initiale des particules observées en considérant un milieu à parcours libre moyen.

Le premier élément à considérer c'est le nombre de particules qui heurte la surface. Pour cela au cours de la diffusion on recense les particules qui heurte la surface jusqu'à l'horizon fini.

On arrête le processus de diffusion (arrêt optimal) quand on atteint un nombre important de particules qui ont heurté la surface.

On procède au calcul de la variation de température de ces particules (l'énergie interne pour chaque particule). Ainsi la somme de ces variations font l'apport en énergie.

Donc notre approche s'exprime ainsi, le processus de diffusion stopper à l'arrêt optimal permet le recensement des particule en collision avec la surface, puis le mouvement des particule est modélisé par une EDS dite équation de Langevin[4] dont on connaît la solution qui représente la composante de la vitesse, ensuite on applique le théorème de Chapman-Komlmogorov 2.5.1 pour déterminer la distribution de la vitesse après collision.

## 3.2 Collision et arrêt optimal

On choisit pour des raisons techniques un temps continu i.e  $T = \mathbb{R}_+$ . On spécifie dans ce qui suit les éléments inhérents dans la détermination de l'apport d'énergie, à savoir :

- $B_t$  : Mouvement brownien de la particule à l'instant  $t \in T$ .
- $(W_t, t \geq 0)$  processus de Wiener généré par le mouvement brownien  $B_t$
- $(\mathcal{F}_t, t \geq 0)$  la filtration naturelle du mouvement brownien :  $(\mathcal{F}_t, t \geq 0) = \sigma(B_s, s \leq t)_{s \in T}$
- $\tau \in T$  le temps d'arrêt (instant de collision de la particule avec la surface : temps d'atteint)
- $(X_t, t \geq 0)$  (solution de l'EDS associé à la diffusion, générée par le mouvement brownien)
- $(X_t, t \geq 0)$  est  $\mathcal{F}_t$ -adapté.
- $X_\tau$  processus arrêté ou stopper au temps d'arrêt.

---

0. On appelle grandeur toute caractéristique qui peut être quantifiée par la mesure ou le calcul. Les différentes valeurs possibles s'exprime à l'aide d'un nombre généralement accompagné d'une unité de mesure. Une grandeur se mesure à l'aide d'un instrument de mesure.

- $\tau^* \in T$  le temps d'arrêt optimal (quand on atteint un nombre important de particules ayant heurté la surface)
- si on considère la surface comme un sous-ensemble  $S$ , alors on a :

$$\tau = \inf \{t > 0; X_t \in S\}$$

### 3.2.1 L'équation de Langevin

L'EDS associé à la diffusion est de la forme :

$$dX_t = b(X_t)dt + a(X_t)dW_t.$$

Le terme  $b(x)$  peut s'interpréter comme la force déterministe agissant sur une particule au point  $x$ , et s'appelle donc le coefficient de dérive. Le terme  $a(x)$  mesure l'effet de l'agitation thermique des molécules du milieu au sein duquel se déplacent les particules en  $x$ , et s'appelle le coefficient de diffusion. Cette EDS admet une solution sous forme intégrale est donnée par :

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(X_s, s)ds + \int_0^t a(X_s, s)dW_s.$$

Le mouvement des particules est modélisé par l'équation de Langevin (2.3.1) , l'EDS correspondant est :

$$dX_t = -\alpha X_t dt + \sigma dW_t. \quad (3.1)$$

où  $\alpha$  et  $\sigma$  comme spécifier dans la section(2.5), dont une solution explicite est donnée par :

$$X_t = e^{-\alpha t} (X_0 + \sigma \int_0^t e^{\alpha s} dW_s)$$

Quand la particule atteint la surface, la solution arrêtée au temps  $\tau$  sera donc :

$$X_\tau = e^{-\alpha \tau} (X_0 + \sigma \int_0^\tau e^{\alpha s} dW_s)$$

A ce stade on veut déterminer la distribution de la composante vitesse de la particule i.e la distribution de  $X_\tau$  après la collision, sachant qu'au limite les vitesses sont Maxwelliennes.

### 3.2.2 Particules en collision

Si on note  $V^N$  le nombre de particules ayant heurter ou fréquenter la surface à l'horizon fini  $N$ , alors le recensement des particules en collision avec la surface, consiste à résoudre le problème d'arrêt optimale suivant :

$$V^N = \sup_{\tau \in T^N} (\mathbb{E}(X_\tau)), \quad T^N = \{0, \dots, N\}$$

Jusqu'au temps d'arrêt  $\tau^*$  tel que :

$$V^N = \mathbb{E}(X_{\tau^*})$$

En connaissant le nombre total de particules, on décide d'arrêter le processus au temps  $\tau^* \in T$ . On procède à la détermination de l'apport d'énergie en question.

### 3.2.3 Détermination de la distribution des vitesses

On considère  $(X_n)_{n \geq 0}$  une chaîne de Markov et notre objectif est de déterminer la loi de  $X_n$ . D'après le théorème de Chapman-Kolmogorov (2.5.1)  $X_n$  satisfait (2.12). Connaissant la distribution de la vitesse qui est étroitement liée à la température on peut ainsi déterminer la variation due après collision.

### 3.2.4 Détermination de l'apport d'énergie

Etant donné le nombre total de particules en collision, pour chaque particule ayant la composante de la vitesse vérifiant la solution de l'EDS (3.2.1), possède une énergie interne avant la collision que l'on note  $U_i$  et après la collision, la particule aura une énergie que l'on note  $U'_i$  sera donnée par :

$$U'_i = U_i + \Delta T \text{ où } \Delta T = T_p(t + \Delta t) - T_p(t)$$

et la quantité d'énergie sera selon (2.4) :

$$Q = \left[ \sum_{i=1..N_2} U_i \right]^{avant} - \left[ \sum_{i=1..N_1} U'_i \right]^{après} \quad (3.2)$$

Deux cas de figure se présente soit :

- si  $Q > 0$  de l'énergie est libérée
- si  $Q < 0$  de l'énergie dissipée.

# Simulation par la méthode de Monte-Carlo

## 4.1 Introduction

En physique statistique, seuls quelques problèmes peuvent être résolus exactement. Pour des problèmes complexes, les méthodes numériques peuvent donner des résultats exacts, cela ne pouvait être résolu que de manière approximative[8].

La simulation numérique peut être un moyen de tester la théorie. Les résultats numériques peuvent être comparés à des résultats expérimentaux. La simulation numérique est placée entre les traitements fondamental et expérimental.

Il a un quasi-expérimental caractère (expérience numérique).

Pour les problèmes de physique statistique, les méthodes de simulation les plus utilisées sont la méthode de Monte Carlo et la méthode de la dynamique moléculaire.

La méthode Monte Carlo est une méthode basée sur l'utilisation des nombres aléatoires pour simuler des systèmes déterministes avec des paramètres ou des entrées stochastiques. Cette méthode a prouvé son efficacité dans de nombreux domaines scientifiques et appliqués comme les mathématiques, les finances, la physique, la biologie, les télécommunications,... etc.

Historiquement, c'est en 1949 que le physicien gréco-américain Nicholas Metropolis et le mathématicien américain d'origine polonaise Stanislaw Ulam publient l'article fondateur de cette méthode de calcul et lui donnent son nom[16].

La première simulation de Monte Carlo (MCS) a été proposée par Metropolis et Al. en 1953 [10]. La deuxième simulation de Monte Carlo a été proposée par Wood et Parcker en 1957 [11]. Les résultats obtenus étaient en bon accord avec les résultats expérimentaux de Bridgman (1953) [12] et celles de Michels et al. (1949) [13].

Dans cette méthode, nous attribuons une série de positions initiales choisies au hasard pour un système de  $N$  particules interagissant à travers un potentiel défini.

Une séquence de configurations de particules est générée en donnant des déplacements successifs aux particules; nous ne retenons que les configurations pour garantir que la densité de probabilité est celle du choix.

## 4.2 Règles générales pour les méthodes de simulation numérique

**Définition 4.2.1** *De manière générale, ce qu'on appelle une méthode de Monte-Carlo est une technique visant à calculer une quantité déterministe par le biais d'un procédé aléatoire.*

Le point de départ de la simulation numérique est un phénomène physique ; son but est d'obtenir des résultats physiques utiles. Entre ces deux points, plusieurs étapes peuvent être identifiées. Ces étapes sont générales et applicable pour MCS. Les étapes peuvent être résumées comme suit :

### 4.2.1 Définition du phénomène physique et hypothèse principale

Le phénomène physique doit être défini par la description du domaine dominant de la physique. Les principales hypothèses et simplification des approximations sont nécessaires pour comprendre le phénomène physique et la conception du premier modèle.

### 4.2.2 Définition du modèle mathématique

Le modèle mathématique nécessite une formulation mathématique du problème. Il peut s'agir d'un problème d'éléments ou d'objets discrets ou d'un problème d'un milieu continu ; il peut s'agir d'un problème spatio-temporel ou problème de fréquence et peut être un problème déterministe ou probabiliste. Il serait intéressant de connaître les équations mathématiques régissent le phénomène :

- Les forces entre particules et éléments ;
- l'interaction potentielle ;
- La détermination d'une échelle de temps ;
- la détermination d'une échelle de longueur ;
- Définition d'amplitudes et de mouvements constants magnitudes ;
- Equations de continuité, équations d'équilibre et équations de transfert ;  
etc. ...

### 4.2.3 Elaboration d'un code de simulation

La technique MCS a été choisie pour ce travail ; sachant que son algorithme de base est nécessaire à l'élaboration de la simulation. Cette étape nécessite quelques actions :

- Validation du modèle sur des cas simples ;
- Calcul de simulation sur des phénomènes complexes.

## 4.3 Les méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov (MCMC)

Les méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov, ou méthodes MCMC pour Markov chain Monte Carlo en anglais, sont une classe de méthodes d'échantillonnage à partir de distributions de probabilité. Ces méthodes de Monte-Carlo se basent sur le parcours de chaînes de Markov qui ont pour lois stationnaires les distributions à échantillonner.

Certaines méthodes utilisent des marches aléatoires sur les chaînes de Markov (algorithme de Metropolis-Hastings, échantillonnage de Gibbs), alors que d'autres algorithmes, plus complexes, introduisent des contraintes sur les parcours pour essayer d'accélérer la convergence (Monte Carlo Hybride (en), Sur-relaxation successive).

Ces méthodes sont notamment appliquées dans le cadre de l'inférence bayésienne. Pour la simulation de nos résultats, donc nous nous intéressons aux méthodes de Monte Carlo par Chaînes de Markov (MCMC) dont on peut donner la définition suivante (Robert p. 126) :

**Définition 4.3.1** *On appelle Algorithme MCMC (pour Markov Chain Monte Carlo), toute méthode produisant une chaîne de Markov ergodique de loi stationnaire la distribution d'intérêt.*

Dans le cas d'une loi a posteriori, on fabrique une chaîne de Markov dont les états sont les valeurs du paramètre et qui lorsqu'elle entre en régime stationnaire fournit (produit) des réalisations de cette loi.

### 4.3.1 Principe du modèle MCMC

On se place dans un espace vectoriel  $\varepsilon$  de dimension finie  $n$ . On veut générer aléatoirement des vecteurs  $x$  suivant une distribution de probabilité  $\pi$ . On veut donc avoir une suite de  $N$  vecteurs  $(x_0, x_1, \dots, x_{N-1})$  telle que la distribution des  $x_i$  approche  $\pi$ .

Les méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov consistent à générer un vecteur  $x_i$  uniquement à partir de la donnée du vecteur  $x_{i-1}$ , c'est donc un processus « sans mémoire », ce qui caractérise les chaînes de Markov. Il faut donc trouver un générateur aléatoire avec une distribution de probabilité  $q_{x_{i-1}}$  qui permet de générer  $x_i$  à partir de  $x_{i-1}$ .

On remplace ainsi le problème de génération avec une distribution  $\pi$  par  $N$  problèmes de génération avec des distributions  $q_{x_i}$ , que l'on espère plus simples.

**Principe** On veut simuler une loi  $\pi$  sur un espace d'états général  $(\Omega; \varepsilon)$ . Une transition sur  $(\Omega; \varepsilon)$  est une application  $P : (\Omega; \varepsilon) \rightarrow [0; 1]$  telle que  $P(\cdot, A)$  pour tout  $A \in \varepsilon$  est mesurable et  $P(x, \cdot)$  pour tout  $x \in \Omega$  est une probabilité sur  $(\Omega; \varepsilon)$ .

Soit  $X = (X_k, k \in \mathbb{N})$  une chaîne de Markov homogène de transition  $P$  et de loi initiale  $X_0 \rightsquigarrow \nu$ , on note  $P_\nu$  la loi de la chaîne  $X$ .

Pour simuler  $\pi$ , on veut savoir construire une transition  $P$  telle que  $\forall \nu, \nu P^k \rightarrow \pi$ , avec convergence en norme en variation totale  $\| \mu \| = \text{Sup}_{A \in \varepsilon} \mu(A) - \text{inf}_{A \in \varepsilon} \mu(A)$ . La chaîne de transition  $P$  est ergodique.



# Bibliographie

- [1] Michel Moisan et Jacques Pelletier Physique des plasmas collisionnels. Application aux décharges haute fréquence .pp 16-17
- [2] FEMTO - Cours de mécanique classique. ©J.ROUSSEL - article sous licence Creative Commons.
- [3] Einstein A 1905 On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat Ann. Phys. 17 16
- [4] Langevin M P 1908 Sur la théorie du mouvement Brownien C. R. Acad. Sci., Paris 146 5303
- [5] G.N. Milstein, Numerical Integration of stochastic differential equations, Mathematics and Its application, Kluwer, Dor
- [6] P.E. Kloeden, E. Platen, Numerical solution of stochastic differential equations, Springer, Berlin, 1992.
- [7] Rosenbluth, M. N. (1957). "Fokker-Planck Equation for an Inverse-Square Force"
- [8] Nicolas Bouleau, Processus Stochastiques et applications, Problèmes et exercices, Edition septembre 2004.
- [9] How to use the Monte Carlo Simulation technique ?  
Application : A study of the gas phase during thin film deposition  
Fethi KHELFAOUI and Oumelkheir BABAHANI 11 July 2019.
- [10] Metropolis N, Rosenbluth A. W, Rosenbluth M. N, Teller A. H, Teller E : Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. J. Chem. Phys. 1953;21 :1087-1092. DOI : 10.1063/1.1699114
- [11] Wood W. W, Parker F. R : Monte Carlo Equation of State of Molecules Interacting with the Lennard-Jones Potential. J. Chem. Phys. 1957;27 :720-733. DOI :10.1063/1.1743822
- [12] Bridgman P. W : Compressibilities and Electrical Resistance under pressure, with special reference to intermetallic compounds. Prod. Am. Acad. Arts Sci. 1935;70 :285-317. DOI : 10.2307/20023138
- [13] Michels A, Wijker Hu, Wijker H. K : Isotherms of Argon Between 0 C and 150 C and Pressures up to 2900 Atmospheres. Physica. 1949;15 :627-6drecht, 1995. 32. DOI :10.1016/0031-8914(49)90119-6
- [14] L. Arnold, Stochastic Differential Equations, Wiley, New York, 1974.

- [15] S.S. Artemiev, Certain aspects of application of numerical methods for solving SDE systems, Bull. Nov. Comp. Center, Num. Anal. 1 (1993) 1-16.
- [16] Méthode de Monte-Carlo et Application aux Processus Aléatoires Rémi Peyre Février 2016.

## ملخص

في هذا العمل ، نهتم بدراسة ظاهرة فيزيائية تتمثل في إشكالية تصادم جسيمات الغاز (المتحركة باستمرار في حركة براونية) مع سطح، حيث نريد معرفة الطاقة المكتسبة بعد الاصطدام مع السطح عند الشروط الحدية، علماً ان الجسيمات ابتداءً تتحرك بسرعة ذات توزيع *Gaussienne* و ذات علاقة وطيدة بدرجة الحرارة للجسيمات، يتم صياغة حل المشكلة بطرح مقارنة تعتمد على النمذجة العشوائية باستخدام السيرورة العشوائية و سلسلة *Markov* و معادلة *Langevin* التفاضلية العشوائية (EDS) و باستخدام نظرية *Chapman-Kolmogorov* من أجل تحديد التوزيع المحتمل للسرعة بعد التصادم مع السطح. وتبين لنا ان هذه المقاربة تساهم بشكل فعال في تدليل وحلقة الإشكالية المطروحة.

**الكلمات المفتاحية:** تصادم، حركة براونية، وقت توقف، معادلة تفاضلية عشوائية.

---

## Résumé

Dans ce travail, nous intéressons à l'étude d'un phénomène physique. Il s'agit du problème des collision de particules d'un gaz (en mouvement brownien) avec une surface ayant une température en occurrence une plaque de soudure. Où on veut déterminer l'apport d'énergie aux conditions limites, sachant que les particules initialement se déplacent avec une vitesse gaussienne, liée étroitement à la température des particules. Notre approche repose sur une modélisation stochastique minutieuse en introduisant un processus aléatoire et la diffusion pour une chaîne de Markov, en modélisant la composante vitesse avec l'EDS de Langevin, puis le Théorème de Chapman-Kolmogorov permet de déterminer la loi de la vitesse après collision avec la surface. Cette approche nous a paru adéquate pour la résolution du problème.

**Mots-clés:** Collision, Processus aléatoire, Mouvement brownien, Temps d'arrêt, EDS.

---

## Abstract

In this work, we are interested in the study of a physical phenomenon. It is the problem of the collision of particles of a gas (in Brownian motion) with a surface having a temperature in this case a weld plate. Where we want to determine the energy supply at boundary conditions, knowing that the particles initially move with a Gaussian speed, closely linked to the temperature of the particles. Our approach is based on careful stochastic modeling by introducing a random process and diffusion for a Markov chain, by modeling the speed component with Langevin's EDS, then Chapman-Kolmogorov's Theorem allows to determine the law of speed after collision with the surface. This approach seemed to us adequate for the resolution of the problem.

**Keywords:** Collision, Random process, Brownian motion, Break time, EDS..