

Résolution de l'équation de LAPLACE, par la méthode de Monte-Carlo

Victor SCHNEIDER, Christophe RIVIERE, Fabien DELHOMME

1^{er} avril 2016

Résumé

L'objectif de ce projet est de calculer une solution de l'équation de LAPLACE à l'aide de la méthode de Monte-Carlo pour des domaines réguliers dans \mathbb{R}^2 . Tout le code de ce projet est posté en ligne à cette adresse : <https://github.com/superLinab/ProjetScientifique>.

1 Présentation de la méthode de Monte-Carlo

1.1 Introduction

La méthode de Monte-Carlo est une méthode d'approximation numérique qui s'appuie sur les propriétés de la marche aléatoire.

Cette méthode est très utilisée dans les domaines scientifiques nécessitant des approximations numériques. Un exemple, lors de l'expérience permettant de mettre en évidence les oscillations des neutrinos (en 2001), il était nécessaire de comparer les données énergétiques expérimentales avec les valeurs numériques que donnait la théorie, valeurs qu'il a fallu estimer numériquement. On a utilisé pour ce faire la méthode de Monte-Carlo¹.

1. source : <http://arxiv.org/abs/nucl-ex/0110005v1>

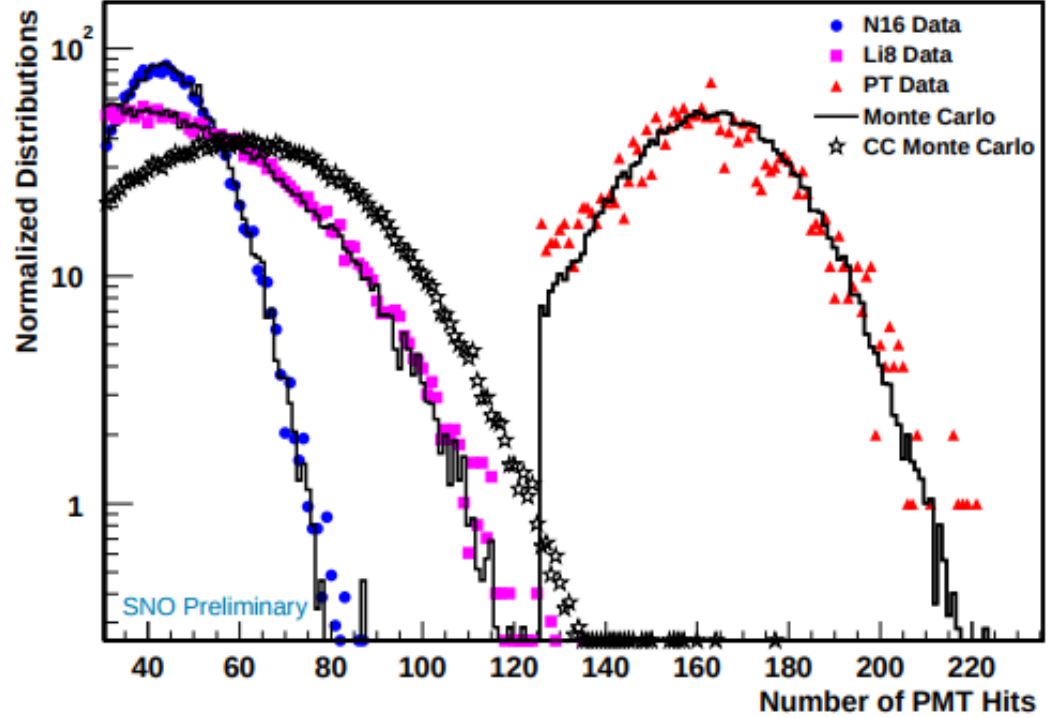


FIGURE 5. Comparison of the Monte Carlo predicted responses to different calibrated sources.

1.2 Idée générale de la méthode

Théorème. *Théorème de transfert dans le cas d'une loi continue.*

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ la fonction densité associée à la variable aléatoire $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$.

Alors

$$\mathbb{E}(\phi(X_1, \dots, X_n)) = \int_{\mathbb{R}^n} \phi(x_1, \dots, x_n) f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n.$$

Si l'on veut calculer une valeur numérique A bien exprimée, on peut la voir grâce au théorème ci-dessus comme une espérance.

Soit A notre valeur numérique à calculer sur un pavé,

$$A = \int_{[a,b]^n} \phi(x_1, \dots, x_n) f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n.$$

Alors

$$A = \mathbb{E}(\phi(X_1, \dots, X_n)).$$

où les X_i sont des variables indépendantes suivant toutes la loi uniforme sur $[a, b]$.

L'idée derrière cette méthode est de pouvoir approximer une valeur numérique par une moyenne de marches aléatoires. Le théorème clef qui autorise cette démarche est la loi forte des grands nombres :

Théorème. *Loi forte des grands nombres.*

Soit $(Y_k)_{k \geq 0}$ une suite de variables aléatoires indépendantes et suivant toutes la même loi, à valeurs dans \mathbb{R}^n . On suppose $\mathbb{E}(|Y_1|) < +\infty$. Alors

$$\frac{Y_1 + \dots + Y_N}{N} \xrightarrow[N \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}(Y_1) \text{ presque sûrement.}$$

Autrement dit, si l'on prend un N assez grand, on peut estimer une espérance de manière relativement précise. On peut alors estimer notre valeur numérique A "simplement" par une moyenne de variable aléatoire. On peut donc utiliser cette méthode pour effectuer un calcul numérique de A .

$$A \approx \frac{\phi(Y_1) + \dots + \phi(Y_N)}{N}$$

où tous les Y_i suivent la même loi que X précédemment.

Or numériquement, on sait faire une moyenne, et on sait modéliser des variables aléatoires.

1.3 Monte-Carlo appliquée à la résolution d'un problème de Laplace

1.3.1 Problème de DIRICHLET

Nous allons utiliser cette méthode pour établir des solutions numériques au problème de DIRICHLET suivant :

Soit $\Omega \in \mathbb{R}$ un domaine borné, et $\partial\Omega$ son bord. On cherche u telle que

$$\Delta u(x) = 0, \quad \forall x \in \Omega$$

$$u(x) = g(x), \quad \forall x \in \partial\Omega, \quad g \text{ connue}$$

Rappelons que dans un problème de DIRICHLET, il y a existence et unicité de la solution, et que celle-ci atteint son maximum et son minimum sur le bord du domaine.

Malheureusement, le domaine est mathématiquement continu, ce que l'ordinateur ne peut pas gérer. Nous allons donc le discrétiser, et nous ramener à un problème de DIRICHLET discret.

1.3.2 Problème de DIRICHLET discret

Comment construire ce problème de DIRICHLET discret ?

Si l'on considère notre discrétisation de pas h . Donc on passe d'une case à l'autre en ajoutant h à nos abscisses, respectivement ordonnées.

u prend ses valeurs dans \mathbb{R}^2 , la formule de Taylor nous donne (on travaille sur les abscisses mais c'est exactement pareil pour les ordonnées) :

$$\begin{cases} u(x+h, y) - u(x, y) &= h\partial_1 u(x, y) + \frac{h^2}{2}\partial_1^2 u(x, y) + O(h^3) \\ u(x-h, y) - u(x, y) &= -h\partial_1 u(x, y) + \frac{h^2}{2}\partial_1^2 u(x, y) + O(h^3) \end{cases}$$

En sommant les deux on obtient :

$$\partial_1^2 u(x, y) = \frac{1}{h^2} [u(x+h, y) + u(x-h, y) - 2u(x, y)] + O(h)$$

$u(x+h, y)$ et $u(x-h, y)$ sont les voisins de $u(x, y)$. On se rend compte qu'on peut alors approximer les dérivées secondes spatial par des différences entres les voisins.

D'où on peut définir le *Laplacien discret* pour toute fonction F de $\Omega \cup \partial\Omega$ dans \mathbb{R} :

$$\overline{\Delta}F = \sum_{\substack{\Omega_d \cup \partial\Omega_d \\ y \sim x}} (F(y) - F(x))$$

avec $y \sim x$ signifiant que y est voisin de x et Ω_d le domaine discrétisé.

Poser cette approximation du Laplacien est pertinent car le calcul effectué avant nous montre qu'alors

$$\Delta F = \frac{1}{h^2} \overline{\Delta}F + O(h)$$

avec $h \sim 0$.

On peut alors approcher le problème de DIRICHLET par un problème de DIRICHLET discret :

$$\begin{aligned} \overline{\Delta}u(x) &= 0, \quad \forall x \in \Omega_d \\ u(x) &= g(x), \quad \forall x \in \partial\Omega_d, \quad g \text{ connue} \end{aligned}$$

1.3.3 Résolution du problème de DIRICHLET discret

Il s'avère que dans ces conditions, pour tout point x du domaine discrétisé, on peut atteindre le bord par une marche aléatoire. En effet, de la même manière que dans la marche de l'ivrogne, celui-ci est sûr de rentrer chez lui

après un déplacement plus ou moins long, notre marche atteindra le bord avec une probabilité de 1.

Quel intérêt y a-t-il à mettre ceci en évidence ?

Et bien cela valide notamment le théorème suivant :

Théorème. $\forall x \in \Omega$, la valeur de $u(x)$ est donnée par :

$$u(x) = \sum_{y \in \partial A} g(y) P(x, \{y\})$$

avec $P(x, \{y\})$ la probabilité que y soit le premier élément de ∂A atteint par la marche aléatoire partant de x .

Remarque : D'après ce qui a été dit précédemment $P(x, \{y\})$ est bien une probabilité puisque $\sum_{y \in \partial A} P(x, \{y\}) = 1$ (on est sûr d'atteindre le bord).

Ce théorème va alors permettre de coder la méthode de Monte-Carlo, puisque l'on connaît $g(y)$ sur notre bord discrétisé, et $P(x, \{y\})$ est obtenu grâce à une moyenne de marches aléatoires.

2 Schéma retenu

2.1 Discrétisation

On commence par discrétiser le domaine choisi. On a choisi de quadriller le domaine. Au début, nous avons commencé par utiliser les coordonnées des points du plan puis exécuter la marche aléatoire en «sautant» de points en points où la distance entre chaque saut est donnée par $1/N$, où N était un paramètre du schéma. Malheureusement, au fur et à mesure des pas, à cause des erreurs d'arrondi, on «sort» de la grille du domaine. Nous avons donc préféré construire une grille (une matrice) qui représente les points du domaine, puis effectuer la marche aléatoire dans cette grille. Les indices d'une matrice étant entier, il n'y a plus d'erreur d'arrondi possible.

La discrétisation s'effectue donc grâce à une matrice remplie de 1 ou 0 pour indiquer respectivement si un point se trouve ou non dans le domaine.

2.2 Marche aléatoire

Il faut maintenant parcourir tout les points de la grille qui sont à l'intérieure du domaine. Pour chaque point du domaine, on lance K marches aléatoires qui commencent en ce point. On fait ensuite la moyenne de toutes les valeurs données par la fonction au bord en tout les points à l'extérieure du domaine atteints après une marche aléatoire.

3 Convergence

3.1 Mise en oeuvre

Pour analyser la convergence nous avons utilisés la propriété du schéma d'être stable par «fusion». C'est-à-dire que si nous avons effectué K marches aléatoires pour chaque point d'un domaine fixé, nous pouvons raffiner le résultat et lancer l marches aléatoires puis faire la moyenne pondérée entre les deux résultats pour obtenir une simulation de $K + l$ marches aléatoires (puisque les marches sont indépendantes les unes des autres).

On utilise donc la formule suivante pour «fusionner» les deux résultats sur un point donnés (i, j) de la grille

$$M_{K+l}(i, j) = \frac{\sum_{i=K}^{i=K+l} v_i + K * M_K(i, j)}{(K + L)}$$

Où les v_i représentent les nouvelles valeurs trouvées lors du lancement des l marches aléatoires au point (i, j) .

3.2 Résultats

Nous avons choisis de faire varier le nombre de marche aléatoire en fixant le maillage de la grille.

En premier lieu, nous exposerons les résultats pour un disque dans \mathbb{R}^2 .

De plus, nous avons trouvé que le moyen le plus simple de tester cette méthode est tout simplement d'imposer des conditions linéaires au bord du domaines. En effet, si g est linéaire, alors elle est elle-même trivialement solution de l'équation de LAPLACE.

D'où par unicité de la solution au problème de DIRICHLET :

$$\forall (x, y) \in \mathcal{D} \quad f(x, y) = g(x, y)$$

Nous avons choisi la norme infinie pour mesurer l'écart entre la solution approchée et la solution exacte. Pour des raisons purement esthétiques, nous avons fixé dans notre étude $g(x, y) = -x - y + 2$ et nous restreignons tous nos domaines dans le pavé $[0; 1]^2$.

Pour la suite nous désignerons K le nombre de marches aléatoires lancées par point, et N le maillage (d'où N^2 le nombre de points de notre grille).

Nous avons mit ce que l'on obtient pour $N = 10, 20, 30$ et $K = 50$ aux Figure 1 et Figure 2.

Dans le but de déterminer la convergence de notre schéma par rapport au nombre de marche aléatoire effectuée, nous avons calculé la distance (en

norme infinie) entre notre solution approchée et notre solution exacte, en fonction du nombre de marche aléatoire lancée. Le résultat est la Figure 3 et Figure 4.

Nous avons fait en sorte que les Figure 3 et Figure 4 montre la convergence de notre schéma et que le résultat final soit moitré dans les Figure 1 et Figure 2. Nous obtenons donc une moyenne de convergence de l'ordre d'environ $O(\frac{1}{K^{0.67}})$.

4 Avantages et désavantages de la méthode de Monte-Carlo

On voit tout de suite les intérêts de cette méthode pour le calcul de la solution de l'équation de LAPLACE :

- La relative simplicité du schéma : la seule difficulté qui s'est présentée fut de créer une grille pour lancer la marche aléatoire.
- Une parallélisation du calcul possible : la solution est construite point par point (!). En effet, contrairement aux schémas classiques qui calculent la valeur en chaque point en faisant la moyenne des points autour, ce schéma aléatoire peut par exemple calculer la solution en un point précis. On remarque aussi que l'on peut facilement stopper le calcul d'une solution pour le reprendre plus tard : il suffit de faire une moyenne des deux résultats.

Ces avantages s'accompagnent de désavantages certains :

- Le bon fonctionnement de l'algorithme dépend en pratique d'un bon générateur de hasard. Ce sujet dépasse (de loin) le cadre de ce projet, mais il serait bon de vérifier la qualité du hasard proposée par *Scilab*
- La difficulté théorique pour justifier la convergence du schéma : il nous faut en effet les résultats issue de la théorie de la probabilité, et en particulier de la marche aléatoire.
- Le temps de calcul est très long ! Nous avons mis plus d'une minute pour générer la troisième image de la Figure 2, alors que notre solution approchée est loin de notre résultat : la convergence trouvée en une puissance -0.67 est très faible.

5 Conclusion

Cette étude nous aura permis de découvrir une nouvelle méthode radicalement différentes des méthodes vues en cours puisqu'elle est basée sur un processus aléatoire pour calculer la solution au problème de DIRICHLET (ici,

associé à l'équation de LAPLACE). On a vu que cette méthode était flexible car elle se code rapidement en *Scilab*, et qu'elle permet de calculer la solution point par point. Mais ces avantages ont un prix : l'ordre de convergence du schéma est très faible. De plus, il n'est pas évident de voir comment améliorer cette convergence (alors qu'avec des méthodes plus classiques on peut essayer de pousser le développement de Taylor un ordre au dessus pour espérer avoir un meilleur ordre de convergence.)

FIGURE 1 – Représentation de la solution approchée pour $N = 10$, puis $N = 20$ et $N = 30$, pour $K = 50$

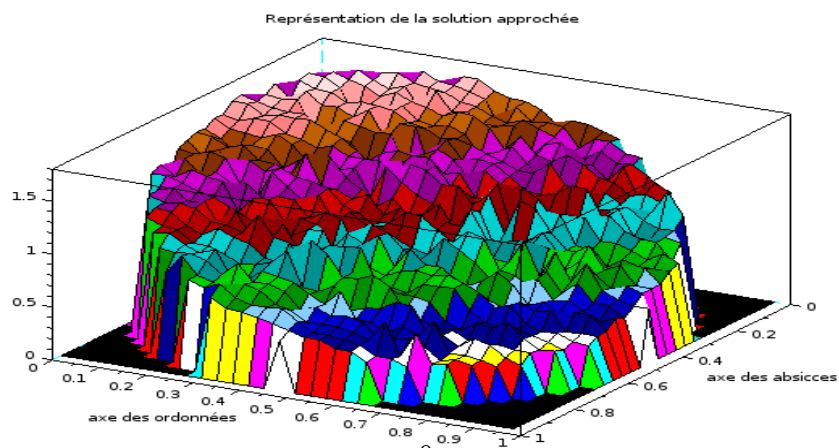
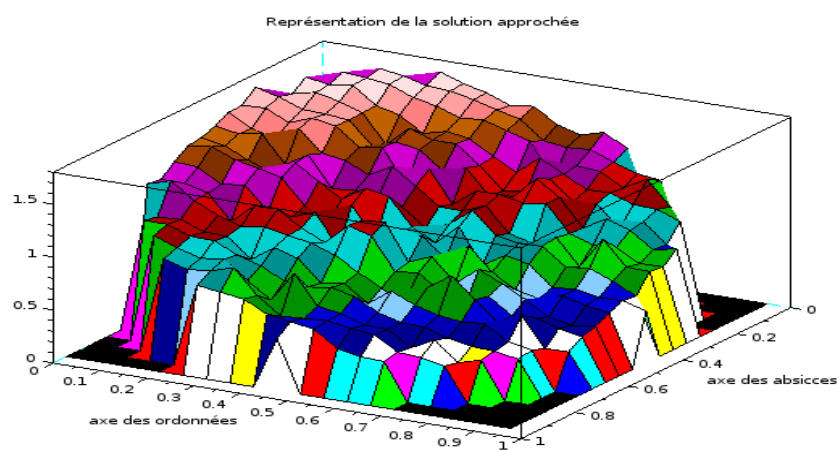
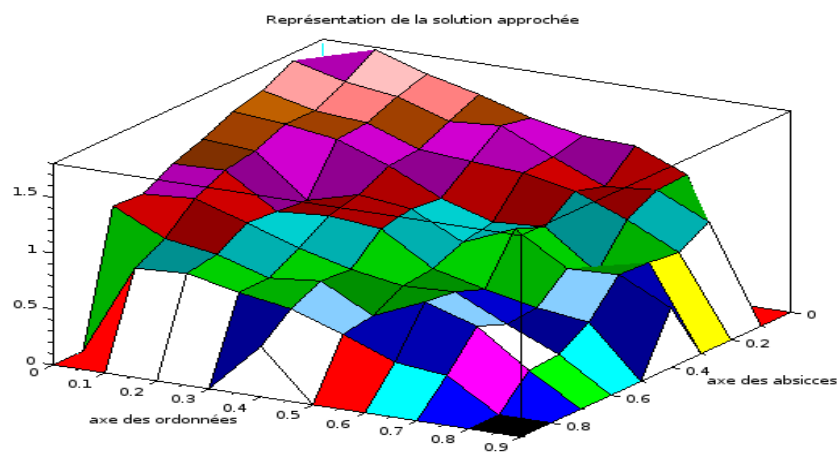


FIGURE 2 – Représentation de la solution approchée pour $N = 10$, puis $N = 20$ et $N = 30$, pour $K = 75$

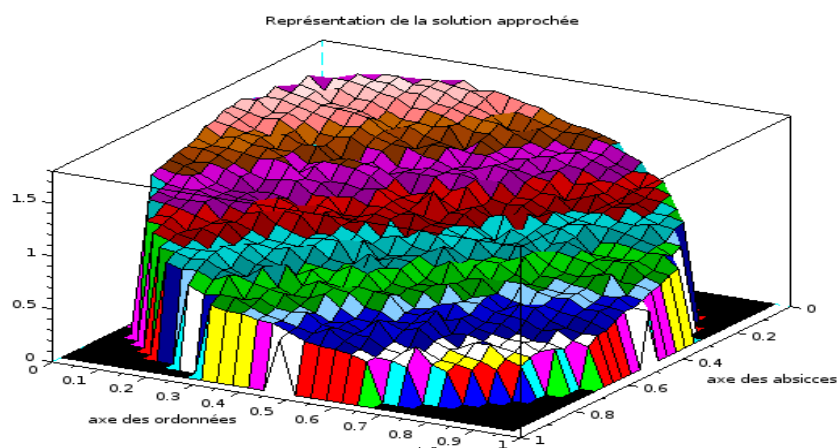
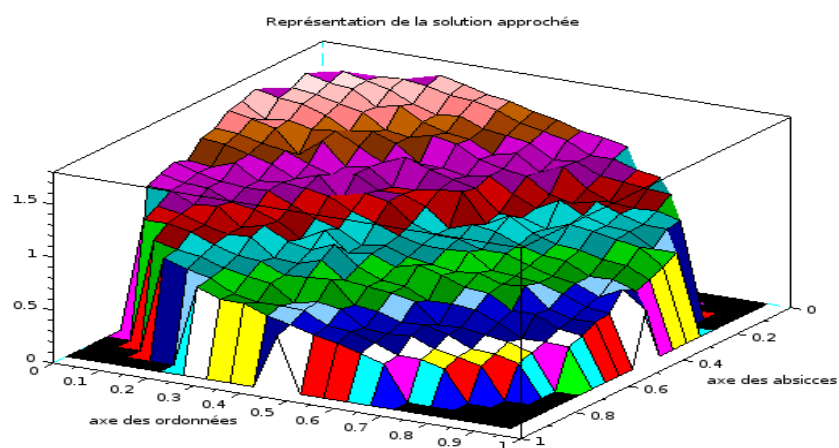
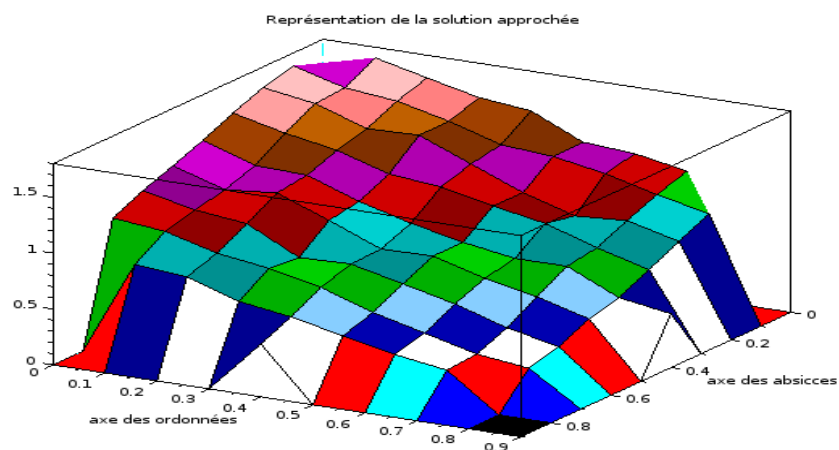


FIGURE 3 – Représentation de la solution approchée pour $N = 10$, puis $N = 20$ et $N = 30$, pour $K = 50$

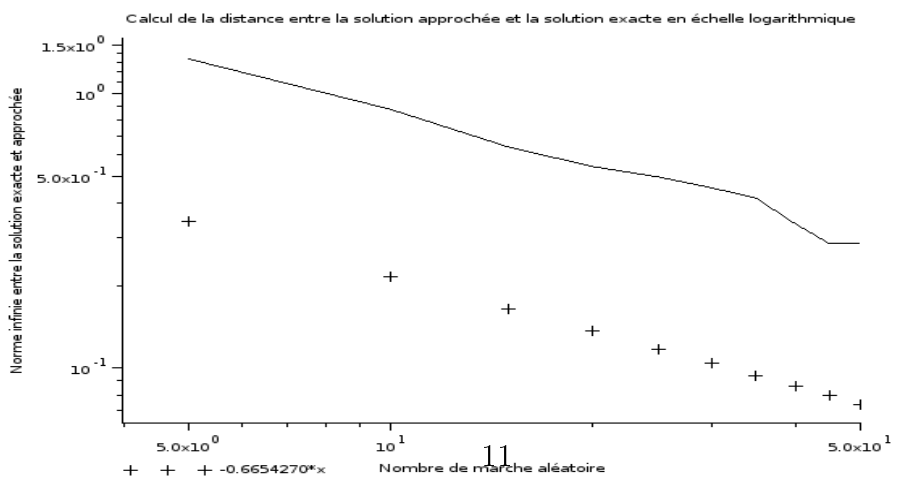
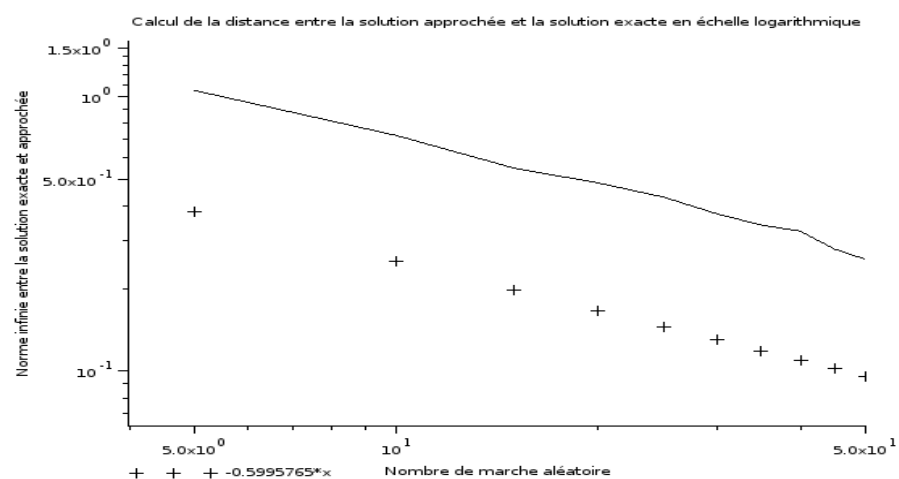
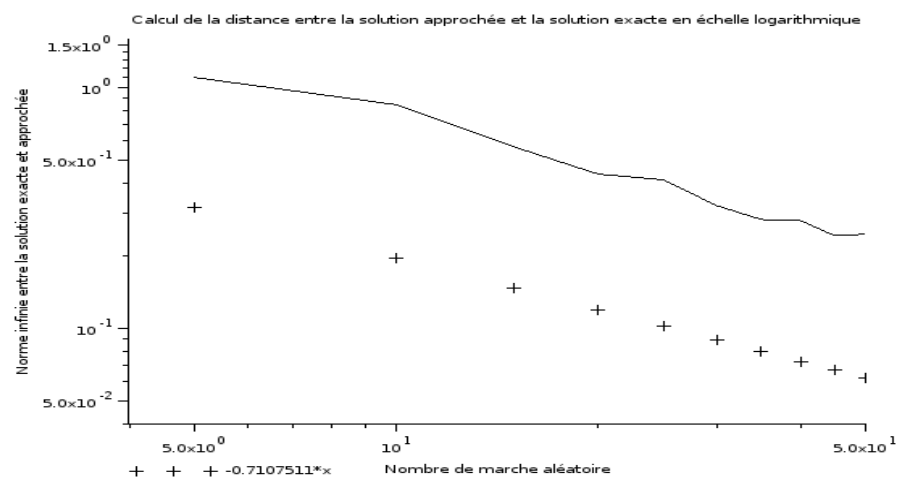


FIGURE 4 – Représentation de la solution approchée pour $N = 10$, puis $N = 20$ et $N = 30$, pour $K = 75$

