Résolution de l'équation de Laplace

Introduction à la méthode de Monte-Carlo

Victor Schneider, Christophe Riviere, Fabien Delhomme

UFR de mathématiques de Strasbourg

4 avril 2016

Table des matières

Qu'est-ce qu'est cette méthode ?

- La méthode de Monte-Carlo est une méthode d'approximation de résultat numérique par l'usage de probabilités.
- Son invention fut révolutionnaire de par l'approche qu'elle envisageait :
  - On utilise en général des données statistiques pour en déduire des probabilités.
  - La méthode de Monte-Carlo, elle, déduit les solutions d'un problème déterministe à partir des probabilités !

L'origine de cette méthode

- Elle fut inventée en 1946 par *Stanislaw Ulam*, physicien américain qui travaillait sur le projet Manhattan, et *John von Neumann*, mathématicien, américain également.

L'origine de cette méthode

- Elle fut inventée en 1946 par *Stanislaw Ulam*, physicien américain qui travaillait sur le projet Manhattan, et *John von Neumann*, mathématicien, américain également.
- Le projet étant top secret, il avait besoin d'un nom de code. L'équipe scientifique décida alors de lui donner le nom de *Monte-Carlo*, en référence au casino du même nom à Monaco.

Utilisation actuelle

C'est une méthode fréquemment employé de nos jours dans les laboratoires pour déterminer des solutions numériques à partir des modèles théoriques, car :

- elle donne des résultats d'une bonne précision.
- la puissance des ordinateurs actuelle est largement suffisante pour pouvoir générer beaucoup de nombres pseudo aléatoires en un temps réduit.

Elle est aussi employée dans la finance (ex : calculs de risque) et bien d'autres domaines, car elle donne des prédictions en général plus précise que les autres méthodes d'analyse.

Table des matières

Idées cachées derrière cette méthode

Derrière cette méthode se cachent deux théorèmes majeurs.

Le premier nous dit que l'on peut peut voir les grandeurs (d'une certaine forme) comme des espérances. C'est le Théorème de Transfert.

Idées cachées derrière cette méthode

Théorème

Théorème de transfert dans le cas d'une loi continue.
Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *la fonction densité associée à la variable aléatoire* $X = (X_1, X_2, ..., X_n)$.
Alors

$$\mathbb{E}\left(\phi(X_1, ..., X_n)\right) = \int_{\mathbb{R}^n} \phi(x_1, ..., x_n) f(x_1, ..., x_n)\, \mathrm{d}x_1 ... \mathrm{d}x_n.$$

Idées cachées derrière cette méthode

Le second théorème nous dit que si l'on a l'espérance d'une variable aléatoire X, alors on peut approcher cette espérance en faisant beaucoup de fois l'expérience donnant X, et en prenant la moyenne des résultats obtenus. Autrement dit l'espérance est l'équivalent probabiliste, lorsque l'on a un grand nombre d'expérience, de la moyenne statistique. C'est la Loi des Grands Nombres.

Idées cachées derrière cette méthode

Théorème

Loi forte des grands nombres.
Soit $(X_k)_{k\geq 0}$ *une suite de variables aléatoires indépendantes et suivant toutes la même loi, à valeurs dans* $\mathbb{R}^n$. *On suppose* $\mathbb{E}(|X_1|) < +\infty$. *Alors*

$$\frac{X_1 + ... + X_N}{N} \underset{N\to+\infty}{\longrightarrow} \mathbb{E}(X_1) \text{ presque sûrement.}$$

Idées cachées derrière cette méthode

En combinant ces deux théorèmes, on peut alors donner une estimation de notre valeur numérique, que l'on aura exprimée comme une espérance.

Cette estimation dépend bien sur du nombre de d'expériences que l'on simulera.

Ces deux théorèmes justifient donc l'existence de cette méthode.

Le problème de Dirichlet discret

On cherche à résoudre ce problème, appelé *Problème de Dirichlet*, en utilisant la méthode de Monte-Carlo :

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

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

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

Le problème de Dirichlet discret

Premier problème qui se présente : les ordinateurs ne gèrent pas la notion de *continuité*. Il va donc falloir *discrétiser* tout ça.

Le problème de Dirichlet discret

La résolution technique de cette discrétisation sera vue plus tard, mais avant ça expliquons pourquoi le problème de Dirichlet et sa contre-partie le problème de Dirichlet discret sont équivalents (ou au moins asymptotes) lorsque l'on prend un pas suffisamment petit.

Le problème de Dirichlet discret

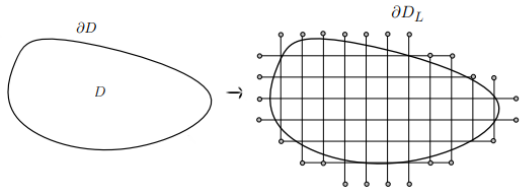


Figure – Discrétisation d'un domaine quelconque dans $\mathbb{R}^2$

Le problème de Dirichlet discret

Appelons h notre pas. On comprend que si (x, y) est dans une "case", alors $(x + h, y)$ sera dans la case à sa droite, $(x - h, y)$ sera dans celle à sa gauche, etc.

Définition

On va montrer que $\triangle u$ peut alors être approché par le *Laplacien Discret*, défini par :

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

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

Le problème de Dirichlet discret

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 :

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

Le problème de Dirichlet discret

On a alors

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

avec $\overline{\triangle}$ le laplacien discret.On peut donc approcher le problème de Dirichlet par celui suivant, appelé problème de Dirichlet discret :

$$\overline{\triangle} u(x) = 0, \quad \forall x \in \Omega_d$$

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

Résolution du problème de Dirichlet discret

Résultats admis

Nous ne le montrerons pas, mais il a été démontré que dans le cas d'une marche aléatoire, au bout d'un certain temps on peut atteindre n'importe quel point de l'espace. Autrement dit, dans la marche de l'ivrogne, l'ivrogne finit toujours par rentrer chez lui !

Résolution du problème de Dirichlet discret

Résultats admis

Nous ne le montrerons pas, mais il a été démontré que dans le cas d'une marche aléatoire, au bout d'un certain temps on peut atteindre n'importe quel point de l'espace. Autrement dit, dans la marche de l'ivrogne, l'ivrogne finit toujours par rentrer chez lui !

Résultats admis

De même, si l'on part de n'importe quel point de notre espace discrétisé, avec une marche aléatoire on atteindra forcément un point du bord de l'espace.

Résolution du problème de Dirichlet discret

Intervient alors notre dernier théorème :

Théorème

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

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

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

Résolution du problème de Dirichlet discret

Ce théorème donne alors directement la méthode nécessaire pour programmer de quoi résoudre le problème de Dirichlet discret numériquement en tout point x de l'espace discrétisé. En effet :

- g est connue, car c'est une donnée du problème

Résolution du problème de Dirichlet discret

Ce théorème donne alors directement la méthode nécessaire pour programmer de quoi résoudre le problème de Dirichlet discret numériquement en tout point x de l'espace discrétisé. En effet :

- g est connue, car c'est une donnée du problème
- On peut également déterminer quels sont les points en bordures de notre espace

Résolution du problème de Dirichlet discret

Ce théorème donne alors directement la méthode nécessaire pour programmer de quoi résoudre le problème de Dirichlet discret numériquement en tout point x de l'espace discrétisé. En effet :

- g est connue, car c'est une donnée du problème
- On peut également déterminer quels sont les points en bordures de notre espace
- Pour approcher $P(x, y)$, il suffit de simuler un grand nombre de fois l'évènement et de faire la moyenne des résultats obtenus.

Attelons-nous y dès maintenant !

Table des matières

Le principe de la méthode de Monte-Carlo

Nous avons choisi de représenter notre domaine par une matrice de 0 et de 1, pour représenter un domaine de ce type :

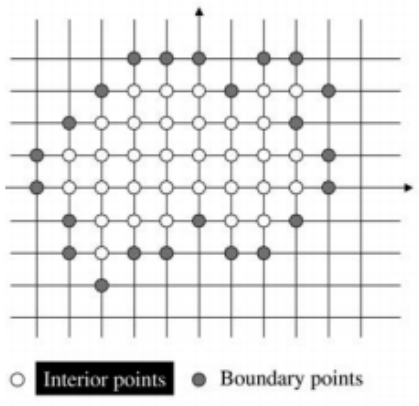


Figure – Discrétisation d'un domaine quelconque dans $\mathbb{R}^2$

Le principe de la méthode de Monte-Carlo

Nous avons choisi de représenter notre domaine par une matrice de 0 et de 1, pour représenter un domaine de ce type :

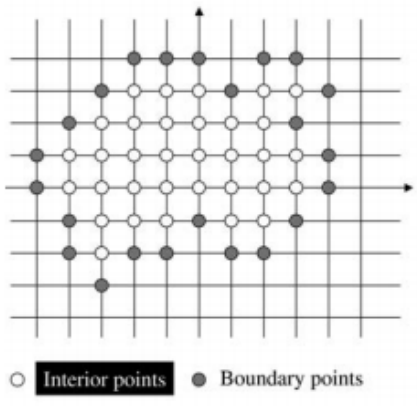


Figure – Discrétisation d'un domaine quelconque dans $\mathbb{R}^2$

- Un domaine discrétisé

Le principe de la méthode de Monte-Carlo

Nous avons choisi de représenter notre domaine par une matrice de 0 et de 1, pour représenter un domaine de ce type :

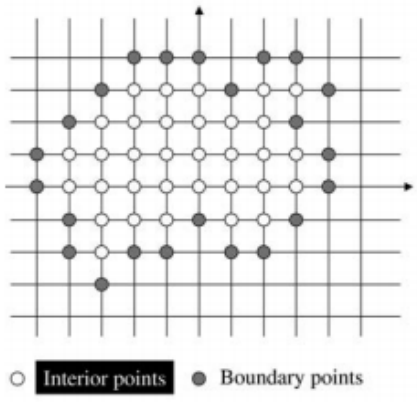


Figure – Discrétisation d'un domaine quelconque dans $\mathbb{R}^2$

- Un domaine discrétisé
- Une fonction définie sur le bord discrétisé du domaine

La marche aléatoire

- À partir de chaque point du domaine, on réalise des marches aléatoires, toutes partant de ce point.

La marche aléatoire

- À partir de chaque point du domaine, on réalise des marches aléatoires, toutes partant de ce point.
- À chaque réalisation correspond une valeur trouvées au bord

La marche aléatoire

- À partir de chaque point du domaine, on réalise des marches aléatoires, toutes partant de ce point.
- À chaque réalisation correspond une valeur trouvées au bord
- On fait la moyenne des valeurs obtenues

Table des matières

Un enjeu majeur

Enjeu majeur

Comment représenter numériquement les éléments du problème ?

Représentation du domaine

Définition

On définit N tel que $\frac{1}{N}$ soit de pas du maillage.
Ainsi plus N est grand, plus on se rapproche du domaine continu réel.

Représentation du domaine

Un mauvais choix

Représenter le domaine par sa fonction indicatrice

Un meilleur choix

Créer une matrice pour représenter le domaine

Par exemple, pour $N = 11$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Autre éléments du programme

- La fonction définie au bord du domaine,
- La réalisation de la marche aléatoire à partir d'un point,
- Le nombre K de marches aléatoires pour chaque point. Plus il est grand, plus on se rapproche de la solution.
- Une procédure qui calcule les valeurs de la solutions ; ces dernière sont placées dans une matrice représentent la discrétisation de la solution.

Table des matières

Table des matières

Rappels des définitions

On rappel que l'on a choisit pour plus de commodité

- De se placer dans un domaine compris dans le pavé $[0;1]^2$,
- On note N le paramètre de discrétisation du domaine,
- On note K le nombre de marche aléatoire lancée par point, (On aura donc lancé à la fin de l'algorithme $K * N^2$ marches aléatoires)
- On note $\partial\Omega$ le bord du domaine Ω,
- On note M la matrice qui représente la solution approchée : $\forall i,j \in [1;N] \quad M(i,j) = f(\frac{x}{N}, \frac{y}{N})$

Choix pour calculer la convergence

Afin de déterminer l'ordre de convergence de la méthode de Monte-Carlo, nous avons choisi une solution évidente de l'équation de Laplace. En effet, soit

$$f(x,y) = a * x + b * y + c \qquad \text{Où } a, b \in \mathbb{R}$$

Alors nous avons trivialement :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0 \qquad \text{Et, } \forall x, y \in \partial\Omega \quad f(x,y) = g(x,y)$$

On a donc

$f(x,y) = a * x + b * y + c$ qui est solution du problème de Dirichlet avec la condition au bord $g(x,y) = f(x,y)$.

Choix de la norme

Norme infinie

On peut donc calculer la distance entre notre solution partielle donnée par la matrice M et la solution exacte, en fonction de K et de N :

$$e_{K,N} = \sup_{i,j \in [1;N]} |M(i/N, j/N) - g(x,y)|$$

Astuce pour calculer la convergence

Problème :

Il s'avère que le programme pour $K \approx 50$ et $N \approx 30$ est assez long à exécuter. Or on veut lancer le programme pour plusieurs K pour un N fixé.

Question :

Comment faire ?

Solution

Il s'avère...

... Que l'on peut fusionner deux schémas qui ont le même N !

Explication

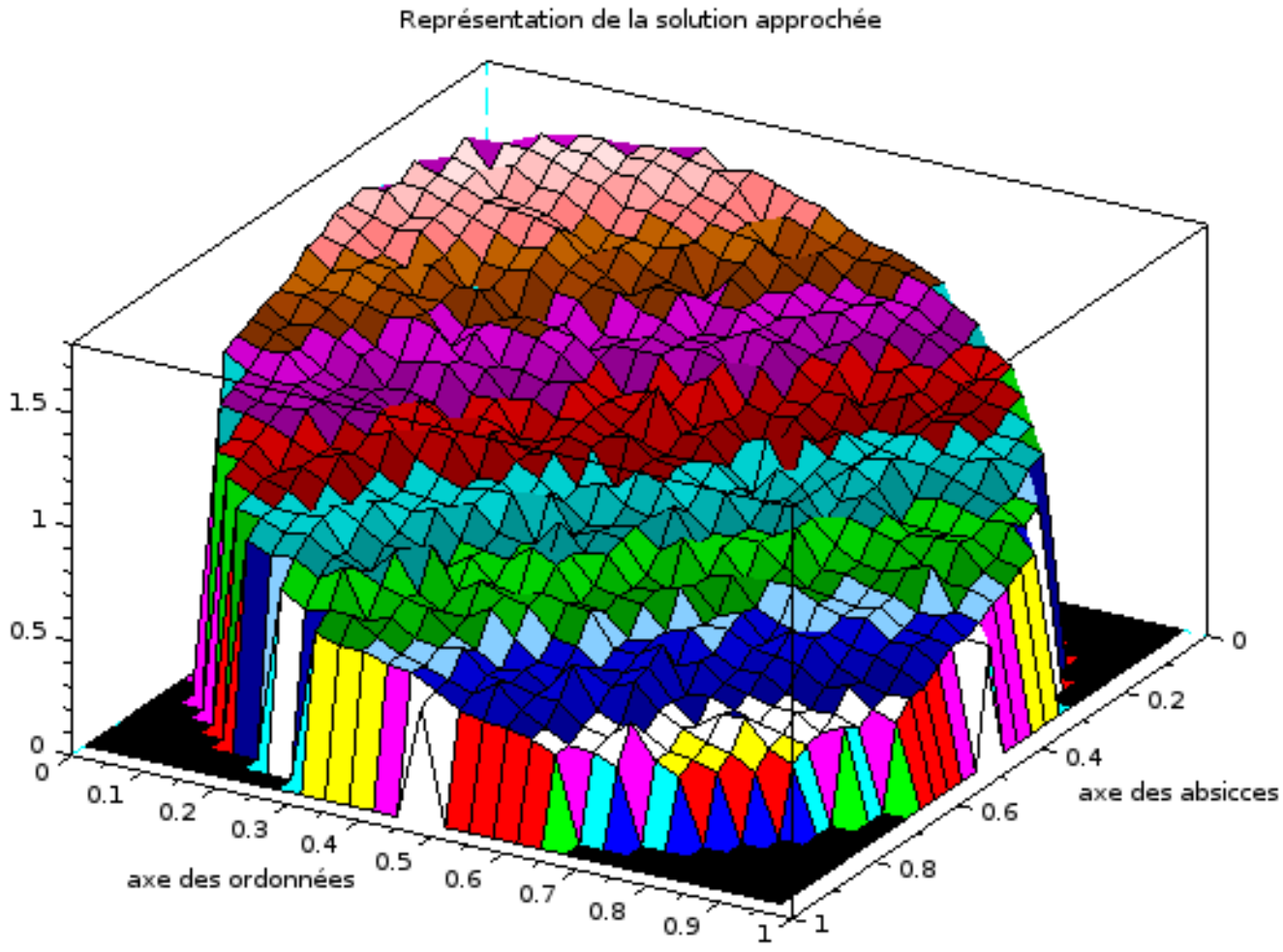
Soit deux matrices représentants respectivement la solution approchée pour N fixée, et avec le nombre de marche aléatoire de K et l. Alors, on peut calculer la matrice qui est une représente de la solution approchée avec comme paramètre N et $K + l$!

Application

Nous avons donc afficher la distance entre la solution approchée et la solution finale pour K qui variaient avec la formule de la moyenne pondérée :

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

Résultat


Représentation de la solution approchée
1.5
1
0.5
0
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1
axe des ordonnées
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
axe des absicces

Résultat

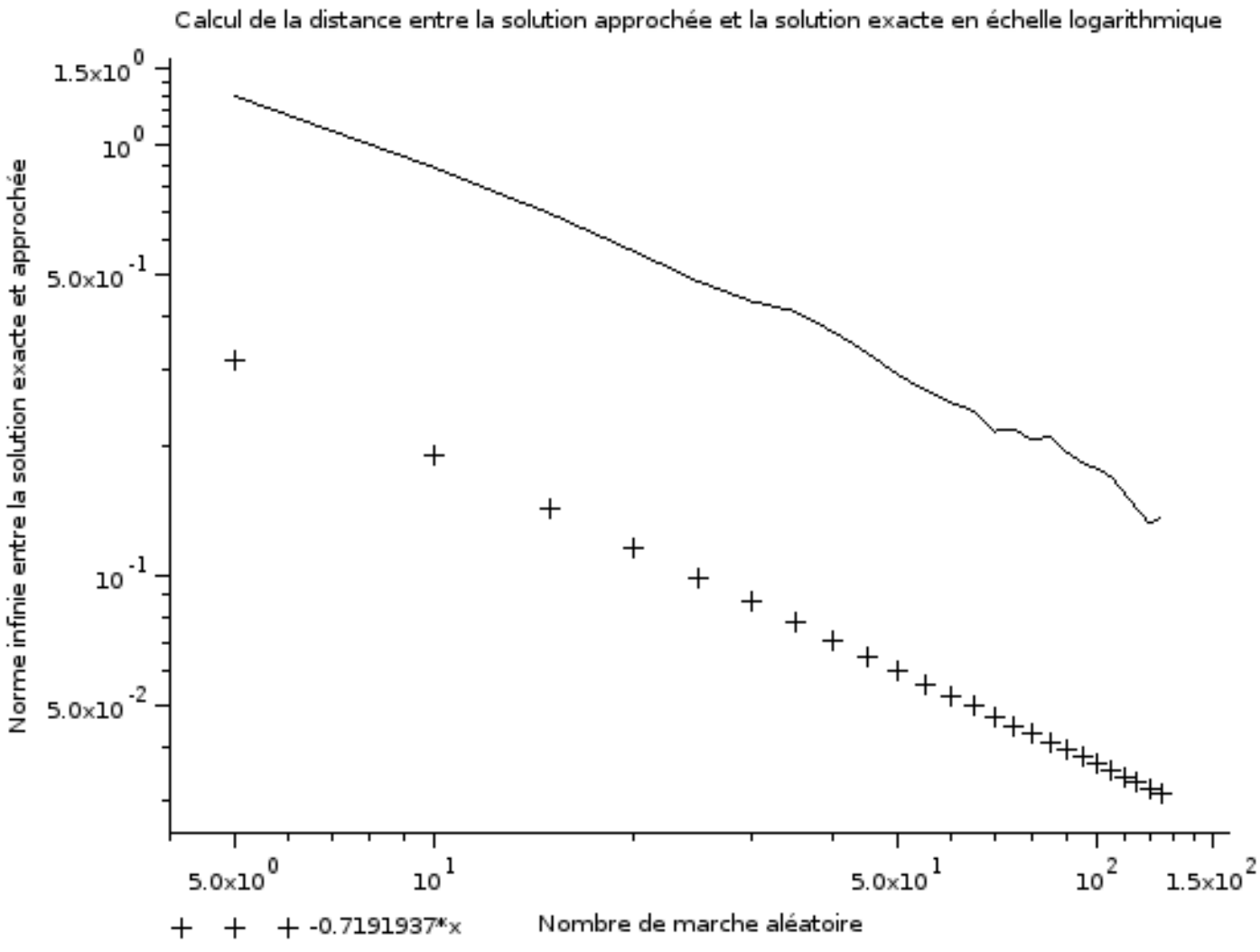

Calcul de la distance entre la solution approchée et la solution exacte en échelle logarithmique
Norme infinie entre la solution exacte et approchée
1.5x10^0
10^0
5.0x10^-1
10^-1
5.0x10^-2
5.0x10^0
10^1
5.0x10^1
10^2
1.5x10^2
+ + + -0.7191937*x
Nombre de marche aléatoire

Table des matières

On distingue quelques avantages de la méthode de Monte-Carlo par rapport aux méthodes plus classiques...

On distingue quelques avantages de la méthode de Monte-Carlo par rapport aux méthodes plus classiques...

- L'implémentation du schéma est plutôt simple (!)

On distingue quelques avantages de la méthode de Monte-Carlo par rapport aux méthodes plus classiques...

- L'implémentation du schéma est plutôt simple (!)
- La solution est calculée point par point.

Qui s'accompagne de quelques inconvénients :

Qui s'accompagne de quelques inconvénients :

- Convergence faible (On a trouvé en moyenne une convergence de l'ordre de $O(\frac{1}{K^{0.67}})$

Qui s'accompagne de quelques inconvénients :

- Convergence faible (On a trouvé en moyenne une convergence de l'ordre de $O(\frac{1}{K^{0.67}})$
- Dépend de la «qualité» du hasard que l'on utilise pour la marche aléatoire.

Qui s'accompagne de quelques inconvénients :

- Convergence faible (On a trouvé en moyenne une convergence de l'ordre de $O(\frac{1}{K^{0.67}})$
- Dépend de la «qualité» du hasard que l'on utilise pour la marche aléatoire.
- Difficulté théoriques pour prouver la convergence pour tout domaine donné.

Qui s'accompagne de quelques inconvénients :

- Convergence faible (On a trouvé en moyenne une convergence de l'ordre de $O(\frac{1}{K^{0.67}})$
- Dépend de la «qualité» du hasard que l'on utilise pour la marche aléatoire.
- Difficulté théoriques pour prouver la convergence pour tout domaine donné.
- Il est aussi très difficile d'améliorer l'ordre de convergence de cette méthode.