

Méthode de Monte-Carlo

Céline Baranger - Julien Mathiaud

2012/2013

Table des matières

1	Introduction	5
2	Rappel sur les notions utiles de probabilités	7
2.1	Variables aléatoires et probabilité	7
2.2	Espérance et variance d'une variable aléatoire	7
2.3	Exemples de variables aléatoires discrètes	8
2.4	Variables aléatoires continues	8
2.5	Exemples de variables aléatoires continues	9
2.6	Notion de variables aléatoires indépendantes	9
2.7	Méthode d'inversion et méthode d'acceptation-rejet	10
3	Description de la méthode de Monte-Carlo	11
3.1	Introduction	11
3.2	Premier exemple de la méthode de Monte-Carlo	12
3.3	Description de la méthode	12
3.4	Convergence de la méthode	13
3.5	Estimation de la variance d'un calcul	14
3.6	Quelques exemples	14
4	Méthodes de réduction de variance	17
4.1	Échantillonnage préférentiel	17
4.2	Méthode des variables de contrôles	18
4.3	Variables antithétiques	18
4.4	Méthode de l'échantillonnage stratifié	18
5	Méthode de Monte-Carlo pour les équations de transport	19
5.1	Introduction	19
5.2	Description d'une méthode particulière	20
6	TD1 : Simulation de grandeurs aléatoires	21
6.1	La distribution uniforme entre 0 et 1	21
6.2	La distribution uniforme entre 0 et 1 (suite)	21
6.3	$\frac{\pi}{4}$ et le quart de cercle	22
6.4	Tirage aléatoire sur la sphère	22
6.5	Méthode de simulation directe	23
6.5.1	Loi uniforme sur $[a, b]$	23
6.5.2	Méthode directe (ou méthode d'inversion)	23

TABLE DES MATIÈRES

6.6	Méthode d'acceptation-rejet	24
6.7	Reconstruction des distributions (ou lois)	25
7	TD2 : Calcul d'intégrales et réduction de variance	27
7.1	Calcul d'intégrale	27
7.2	Réduction de variance	27
8	TD3 : Simulation numérique du transport pur	29
9	TD4 : Simulation numérique du transport avec collision	31
9.1	Équation du transport avec collision	31
9.2	L'approximation de la diffusion	32
9.3	L'équation de Boltzmann	32

Chapitre 1

Introduction

La naissance de la méthode Monte-Carlo remonte à 1777 : Comte de Buffon, décrit une méthode de calcul de π basé sur la réalisation d'expériences répétées. La véritable dénomination de la méthode date de l'apparition des premiers ordinateurs et de l'utilisation de cette méthode dans le cadre des projets secret américains dans les années 1940-1945, en vue de la conception de la première bombe atomique (article fondateur : Metropolis-ULam, the Monte-Carlo method, 1949).

Pour avoir une première idée de la méthode, voici un cas simple d'utilisation de la méthode de Monte-Carlo : le calcul d'intégral. Soit $I = \int_0^1 f(x) dx$, une intégrale à calculer. On l'approche classiquement par une somme discrète : $\sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i)$, avec $\omega_i \geq 0$ tels que $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$ et x_i des points de l'intervalle $[0, 1]$ régulièrement espacé (par exemple, $\omega_0 = \omega_n = \frac{2}{n}$, $\omega_i = \frac{1}{n}$ pour $0 < i < n$ et $x_i = \frac{i}{n}$, alors on obtient la méthode des trapèzes). Pour la méthode de Monte-Carlo, on choisit $\omega_i = \frac{1}{n}$ et on tire au hasard les points x_i (pas ci au hasard que cela mais plutôt tiré selon la loi uniforme sur $[0, 1]$), et on utilise toujours la formule $I \approx \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i)$. Cette méthode converge mais avec une vitesse de l'ordre de $\frac{K}{\sqrt{n}}$ (K une constante). Cette vitesse est faible par rapport aux autres méthodes d'intégration en dimension 1, mais le gros avantage, c'est que la vitesse de convergence est indépendante de la dimension, et la méthode de Monte-Carlo prend alors tout son sens lorsque l'on cherche à calculer les intégrales en dimensions élevées.

Chapitre 2

Rappel sur les notions utiles de probabilités

2.1 Variables aléatoires et probabilité

Une **variable aléatoire** est une fonction définie sur un ensemble Ω qui prend ses valeurs dans un autre ensemble E :

$$\begin{aligned} X : \Omega &\rightarrow E \\ \omega &\mapsto X(\omega) \end{aligned}$$

Ω est un ensemble muni d'une tribu \mathcal{A} , E d'une tribu \mathcal{E} , et $X : \Omega \rightarrow E$ est mesurable (i.e. pour tout $F \in \mathcal{E}$, alors l'ensemble $X \in F$ est dans \mathcal{A} (i.e. est mesurable)).

Dans tous les cas que l'on traite on a $E = \mathbb{R}^d$, \mathcal{E} est la tribu des boréliens de \mathbb{R}^d .

Il faut donner un poids à chaque réalisation ω de Ω : on utilise une mesure positive sur (Ω, \mathcal{A}) , de masse totale 1, notée P et appelée **probabilité**.

2.2 Espérance et variance d'une variable aléatoire

Lorsqu'une variable aléatoire X prend ses valeurs dans \mathbb{R} ou bien \mathbb{R}^d (i.e. $\Omega = \mathbb{R}$ ou \mathbb{R}^d), cette mesure P permet de calculer l'**espérance** de X , que l'on note $E(X)$.

$$E(X) = \int_{\Omega} X(\omega) dP(\omega)$$

Cette espérance n'est définie que si $E(|X|) = \int_{\Omega} |X(\omega)| dP(\omega) < +\infty$.

Si $\Omega = \mathbb{N}$, la mesure P (notée, pour $i \in \mathbb{N}$, $p_i = P(i)$) permet de définir l'espérance discrète

$$E(X) = \sum_{i \in \mathbb{N}} x_i p_i$$

La **loi** de la variable aléatoire X est la mesure image de P par l'application X . C'est une mesure sur E , que l'on notera μ_X . La loi de X sous P , μ_X est caractérisée par la

propriété suivante : pour toute application f de E dans \mathbb{R} , mesurable et positive,

$$E(f(X)) = \int_E f(x) d\mu_X(x) = \int_{\Omega} (f(X))(\omega) dP(\omega).$$

On définit alors la **variance** par $Var(X) = \sigma^2 = E(X^2) - (E(X))^2$, et σ est l'écart-type.

Remarque : comme $E(X^2) - (E(X))^2 = E((X - E(X))^2)$, cette quantité est bien ≥ 0 .

2.3 Exemples de variables aléatoires discrètes

Une variable aléatoire est discrète quand $\Omega = \mathbb{N}$.

$$\begin{aligned} X : \mathbb{N} &\rightarrow \mathbb{R} \\ i &\mapsto X(i) = x_i \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

On dote l'espace \mathbb{N} d'une probabilité P .

On va définir les variables aléatoires par leur loi sous P .

La distribution de poisson discrète : $P(X = n) = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}$, pour $n \in \mathbb{N}$. L'espérance de cette variable aléatoire est $E(X) = \lambda$ et la variance : $Var(X) = \lambda$.

La distribution binomiale : $P(X = n) = C_N^n p^n (1-p)^{N-n}$ avec $p \in [0, 1]$ et N un entier. L'espérance de cette variable aléatoire est $E(X) = Np$ et la variance : $Var(X) = Np(1-p)$.

La distribution géométrique : on répète un nombre d'expérience de manière indépendante. Il y a deux résultats possibles à chaque expérience : réussite (de probabilité p) et on arrête, ou échec (proba $q = 1-p$) et on continue. Alors, $P(X = n) = q^{n-1}p$, $E(X) = \frac{1}{p}$, $Var(X) = \frac{1}{p^2} - \frac{1}{p}$.

2.4 Variables aléatoires continues

C'est une variable aléatoire réelle, i.e. $(E, \mathcal{E}) = (\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ et telle que $\Omega = \mathbb{R}$, ou \mathbb{R}^d ou un intervalle de ces espaces. On définit la **fonction de distribution cumulative** (ou fonction de répartition) par :

$$F(x) = P(X \leq x)$$

Propriété de la fonction de répartition : F est croissante sur $] -\infty, +\infty[$, continue à droite, $\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0$, $\lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1$. Quand F est continue partout et dérivable par morceaux, alors sa dérivée est notée $F'(x) = f(x)$ et est la loi de la variable aléatoire X sous P . Alors $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$, et on retrouve F par $F(x) = \int_{-\infty}^x f(\zeta) d\zeta$. De même,

$$P(x \leq X \leq x + dx) = f(x) dx$$

On peut montrer que l'espérance mathématique devient :

$$E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x dF(x).$$

Cette fonction de répartition est utilisée dans la méthode d'inversion.

Rappel sur les notions utiles de probabilités

Proposition 2.4.1 Si r est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ et si F est la fonction de répartition d'une variable aléatoire de loi f . Alors $\xi = F^{-1}(r)$ est une variable aléatoire de fonction de répartition F et de loi f .

Cette proposition permet ainsi d'obtenir analytiquement les formules pour simuler un grand nombre de lois.

Remarque 1 Souvent la distribution f n'est pas normalisée. Il faut penser à la multiplier par une constante afin que $\int_a^b f(x)dx = 1$.

2.5 Exemples de variables aléatoires continues

La distribution uniforme sur $[0, a]$:

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \leq 0 \\ x/a & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ 1 & \text{pour } x \geq a \end{cases}$$

La loi de la variable aléatoire est alors :

$$f(x) = F'(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \leq 0 \\ 1/a & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{pour } x \geq a \end{cases}$$

Les espérance et variance sont : $E(X) = \frac{1}{2}a$, $Var(X) = \frac{1}{12}a^2$.

La distribution exponentielle :

$$F(x) = \begin{cases} 1 - e^{-\lambda x} & \text{pour } x \geq 0 \\ 0 & \text{pour } x < 0 \end{cases}$$

La loi de la variable aléatoire est alors :

$$f(x) = F'(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x} & \text{pour } x \geq 0 \\ 0 & \text{pour } x < 0 \end{cases}$$

La loi de la variable aléatoire est alors : $E(X) = \frac{1}{\lambda}$, $Var(X) = \frac{1}{\lambda^2}$.

La distribution normale :

$$F(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}} dt, \quad F'(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}.$$
$$E(X) = \mu, \quad Var(X) = \sigma^2.$$

2.6 Notion de variables aléatoires indépendantes

On dit de deux variables aléatoires X_1 et X_2 qu'elles sont indépendantes si on a pour toutes fonctions mesurables positives f_1 et f_2 ,

$$E(f_1(X_1) f_2(X_2)) = E(f_1(X_1)) E(f_2(X_2)).$$

De même, des variables aléatoires X_1, \dots, X_n sont indépendantes si pour toutes fonctions mesurables positives f_1, \dots, f_n

$$E(f_1(X_1) \cdots f_n(X_n)) = E(f_1(X_1)) \cdots E(f_n(X_n))$$

2.7 Méthode d'inversion et méthode d'acceptation-rejet

La méthode d'inversion utilise la fonction de répartition.

Nous nous plaçons dans le cas où les grandeurs à simuler suivent une loi de distribution quelconque entre a et b (a et/ou b peuvent être infinis), notée f (que l'on suppose normalisée, c'est à dire $\int f = 1$). On note F la fonction de répartition de f , soit :

$$F(x) = \int_a^x f(u)du$$

Proposition 2.7.1 *Si r est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ alors $\xi = F^{-1}(r)$ est une variable aléatoire de fonction de répartition F et de loi f .*

Cette proposition permet ainsi d'obtenir analytiquement les formules pour simuler un grand nombre de lois.

Remarque 2 *Souvent la distribution f n'est pas normalisée. Il faut penser à la multiplier par une constante afin que $\int_a^b f(x)dx = 1$.*

Lorsque l'on ne peut pas inverser la fonction de répartition (même en utilisant les astuces comme pour la distribution gaussienne, voir le TD1), on utilise **la méthode d'acceptation-rejet** (similaire au calcul de π).

Supposons que l'on connaisse une borne M à f , définie sur l'intervalle $[a, b]$:

$$f(x) \leq M$$

Alors, $f(x)/M \leq 1$.

On engendre des nombres aléatoire r_1 à distribution uniforme sur $[a, b]$, et r_2 à distribution uniforme sur $[0, 1]$.

Si dans le carré $[a, b] \times [0, 1]$ le point (r_1, r_2) est 'sous' la courbe $y = f(x)/M$, alors le nombre aléatoire r_1 est gardé, sinon il est rejeté :

- si $r_2 \leq f(r_1)/M$ alors $\xi = r_1$ est le nombre aléatoire cherché.
- si $r_2 \geq f(r_1)/M$ alors la paire (r_1, r_2) est rejetée.

On recommence cette étape autant que nécessaire afin d'avoir le nombre désiré de nombres aléatoires .

Chapitre 3

Description de la méthode de Monte-Carlo

Le terme méthode de Monte-Carlo désigne toute méthode visant à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, c'est à dire des techniques probabilistes. Le nom de ces méthodes fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte-Carlo, et a été inventé en 1947 par N. Metropolis, dans un article publié pour la première fois en 1949 (Metropolis-Ulam, the Monte-Carlo method, Journal of the American Statistical Association)

3.1 Introduction

La méthode de Monte-Carlo est une méthode d'approximation, au sens statistique du terme. Il n'y a pas de définition précise de ce qu'est une technique de type Monte-carlo, mais la description la plus habituelle consiste à dire que les méthodes de ce type se caractérisent par l'utilisation du hasard pour résoudre des problèmes centrés sur le calcul d'une valeur numérique. La réponse fournie sera une réponse statistique, de type "la valeur cherchée I se trouve très probablement (par exemple avec une probabilité au moins égale à 0,95) dans l'intervalle de confiance $]I_1, I_2[$ ". La précision est mesurée par la taille $I_2 - I_1$ de l'intervalle de confiance. Si on utilise n points échantillonnés de manière indépendante, la méthode converge en $o(\frac{1}{\sqrt{n}})$, quelque soit la dimension du problème, d'où son intérêt en grande dimension (parfois pour des fonctions à plusieurs dizaines de variable, la méthode de Monte-Carlo est le seul outil capable de donner une réponse en un temps raisonnable).

Applications de la méthode : en finance, en sismologie, télécommunication, ingénierie physique, biologie, sciences sociales.

Attention, elles peuvent être gourmandes en temps de calcul si elles ne sont pas utilisées correctement (d'où la nécessité d'utiliser des techniques de réduction de variance) et il est nécessaire de savoir mimer sur un ordinateur le comportement aléatoire du hasard (générateur de nombre pseudo-aléatoire, cf TP 1).

3.2 Premier exemple de la méthode de Monte-Carlo

Un premier exemple de méthode de Monte-Carlo, est la détermination du nombre π , via l'estimation de la surface du cercle de rayon 1. On considère un grand nombre (N) de paires de nombres (r_1, r_2) tirés avec une distribution uniforme. L'ensemble de ces points sont donc dans le carré de coté $[0, 1] \times [0, 1]$. La proportion p de points qui sont dans le cercle unité va tendre vers π quand le nombre de points N tend vers $+\infty$ (Le point (r_1, r_2) est dans le cercle unité si $r_1^2 + r_2^2 \leq 1$.)

3.3 Description de la méthode

Pour utiliser une méthode de Monte-Carlo, on doit tout d'abord mettre sous la forme d'une espérance la quantité que l'on cherche à calculer. C'est souvent simple (calcul d'intégrale par exemple) mais peut-être plus compliqué (équations aux dérivées partielles par exemple).

A l'issue de cette étape, il reste à calculer une quantité de la forme $E(X)$, c'est à dire l'espérance de la variable aléatoire X . Pour calculer $E(X)$, il convient de savoir simuler une variable aléatoire selon la loi de X . On dispose alors d'une suite $(X_i)_{1 \leq i \leq N}$ de N réalisations de la variable aléatoire X . On approxime alors $E(X)$ par

$$E(X) \approx \frac{1}{N}(X_1 + \cdots + X_N)$$

Application au cas du calcul d'une intégrale : on cherche à calculer

$$I = \int_{[0,1]^d} f(u_1, \dots, u_d) du_1 \cdots du_d$$

1. Mise sous forme d'espérance : on pose $X = f(U_1, \dots, U_d)$ où U_1, \dots, U_d sont des réalisations de la loi uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$, alors $E(X) = E(f(U_1), \dots, U_d) = I$
2. Simulation de la variable aléatoire : on suppose que l'on dispose d'une suite $(U_i)_{i \geq 1}$ de réalisations de la loi uniforme sur $[0, 1]$. On pose alors $X_1 = f(U_1, \dots, U_d)$, $X_2 = f(U_{d+1}, \dots, U_{2d})$, etc. Alors les (X_i) sont des réalisations de la variable aléatoire X et

$$I \approx \frac{1}{N}(X_1 + \cdots + X_N)$$

Remarque : cette méthode est facilement programmable, et ne dépend pas de la régularité de f (on lui demande juste d'être mesurable).

Souvent on cherche à évaluer une intégrale plus générale :

$$I \approx \int_{\mathbb{R}^d} g(x) f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} g(x_1, \dots, x_d) f(x_1, \dots, x_d) dx_1, \dots, dx_d$$

avec f positive, $\int_{\mathbb{R}^d} f(x) dx = 1$. Alors $I = E(g(X))$ où X est une variable aléatoire à valeur dans \mathbb{R}^d de loi f .

Ainsi, on approche I par

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i),$$

si (X_i) est un échantillon tiré selon la loi f .

3.4 Convergence de la méthode

C'est la loi forte des grands nombres qui permet de justifier la convergence de la méthode, et le théorème de la limite centrale qui précise la vitesse de convergence.

Théorème 1 Loi forte des grands nombres Soit $(X_i, i \geq 1)$ une suite de réalisations de la variable aléatoire X . On suppose que $E(|X|) < +\infty$. Alors, pour presque tout ω (i.e. $\exists N \in \Omega$ avec $p(N)=0$ et $\omega \notin N$)

$$E(X) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} (X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega))$$

Première remarque : la méthode de Monte-Carlo ne peut donc s'utiliser que pour des variables aléatoires intégrables.

Pour avoir une idée de l'intérêt de la méthode, il faut pouvoir évaluer l'erreur commise.

Définition 1 L'erreur est définie par $\epsilon_n = E(X) - \frac{1}{n}(X_1 + \dots + X_n)$

Le théorème de la limite centrale donne un asymptotique de l'erreur ϵ_n , mais de nature aléatoire. Il dit que la loi de l'erreur finit par ressembler à une loi gaussienne centrée :

Théorème 2 Soit $(X_i, i \geq 1)$ une suite de réalisation de la variable aléatoire X . On suppose que $E(X^2) < +\infty$. On note σ^2 la variance de X ($\sigma^2 = E(X^2) - (E(X))^2$), alors $\frac{\sqrt{n}}{\sigma} \epsilon_n$ converge en loi vers une gaussienne centrée réduite G .

Cela signifie que si G est une variable aléatoire de loi $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$ et si f est une fonction continue bornée, $E(f(\frac{\sqrt{n}}{\sigma} \epsilon_n))$ converge vers $E(f(G)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$.

Utilisation pratique de ce théorème :

Remarque 1 On peut aussi montrer que pour tout c_1 et c_2 , $\lim_{n \rightarrow +\infty} P(\frac{\sigma}{\sqrt{n}} c_1 \leq \epsilon_n \leq \frac{\sigma}{\sqrt{n}} c_2) = \int_{c_1}^{c_2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$

Dans les applications, on oublie le passage à la limite, et on remplace ϵ_n par une gaussienne centrée de variance $\frac{\sigma^2}{n}$.

Remarque 2 Le théorème de la limite centrale ne permet jamais de borner l'erreur (le support d'une gaussienne est égale à \mathbb{R} en entier). On présente souvent l'erreur de la méthode de Monte-Carlo, soit en donnant l'écart-type de l'erreur ϵ_n , c'est à dire $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, soit en donnant un intervalle de confiance à 95% pour le résultat. Comme $P(|N| < 1,96) = 0,95$, si N est une variable aléatoire de loi la gaussienne centrée réduite, cela signifie que $P(|\epsilon_n| \leq 1,96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}) \approx 0,95$.

Définition 2 L'intervalle de confiance à 95% est donc $[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - 1,96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i + 1,96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}]$.

(attention, il faut se souvenir que la variance σ^2 n'est pas plus connu que la solution cherchée $E(X)$, on verra plus loin comment l'estimer au mieux).

Remarque 3 La vitesse de convergence est en $\frac{1}{\sqrt{n}}$, ce qui n'est pas très rapide, mais c'est parfois la seule méthode accessible, de plus cette vitesse ne change pas si on est en grande dimension, et elle ne dépend pas de la régularité de f .

3.5 Estimation de la variance d'un calcul

On désire évaluer la variance d'un calcul par Monte-Carlo d'une intégrale de type $I = \int_{\mathbb{R}} x f(x) dx = E(X)$ avec X une variable aléatoire de loi f . Soit X_i des réalisations de X , on approche I par $\bar{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$

Définition 3 variance empirique de X

$$\bar{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i^2 - \bar{I}^2)$$

$\bar{\sigma}_n^2$ est un estimateur sans biais de σ^2 , c'est à dire que $E(\bar{\sigma}_n^2) = \sigma^2$ et que la suite $\bar{\sigma}_n^2$ converge vers σ^2 presque sûrement quand $n \rightarrow +\infty$. Cela signifie qu'au cours d'un calcul Monte-Carlo, on peut simultanément calculer l'approximation de l'espérance et de sa variance, ce qui permet d'obtenir un intervalle de confiance à 95%.

3.6 Quelques exemples

Exemple 1 Soit f une fonction mesurable sur $[0, 1]$. On cherche à calculer $p = \int_{f(x) \geq \lambda} dx$, λ une constante donnée.

Soit X la variable aléatoire $X = 1_{f(U) \geq \lambda}$ (U étant une variable aléatoire dans $[0, 1]$ suivant la loi uniforme).

Alors $p = E(X)$ et $\sigma^2 = \text{Var}(X) = p(1-p)$. A l'issu de n tirages indépendants selon la loi de X , on a :

$$p_n = \frac{X_1 + \dots + X_n}{n} \approx p + \frac{\sigma}{\sqrt{n}} G$$

pou faire une erreur moyenne $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ de l'ordre de 0,01, comme $p(1-p) \leq \frac{1}{4}$, il faut prendre n de l'ordre de 2500. Aussi l'intervalle de confiance à 95% est alors $[p_n - 1,96 * 0,01, p_n + 1,96 * 0,01]$.

Si la valeur de p à estimer est de l'ordre de 0.5, l'erreur est acceptable.

Par contre, si p est proche de 0 (ou de 1), comme $\sigma \approx \sqrt{p}$ (ou bien $\sqrt{1-p}$), l'erreur relative est $\frac{\sigma}{\sqrt{n}E(X)} = \frac{1}{\sqrt{n}\sqrt{p}}$, donc il faut beaucoup de tirages aléatoires (n grand), pour estimer un p convenable.

Description de la méthode de Monte-Carlo

Exemple 2 On cherche à calculer $I = E(\exp(\beta G))$, avec G variable aléatoire gaussienne centrée réduite. Alors, le calcul exact montre que $I = e^{\frac{\beta^2}{2}}$.

Par la méthode de Monte-Carlo, on pose $X = e^{\beta G}$, donc $I = E(X)$. La variance de la variable aléatoire X vaut $\sigma^2 = e^{2\beta^2} - e^{\beta^2}$.

L'erreur relative moyenne est $e = \frac{\sigma}{I\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{e^{\beta^2}-1}{n}}$ donc $n \approx \frac{e^{\beta^2}-1}{e^2}$. Si on souhaite avoir $e = 1$, et si $\beta = 5$, on doit prendre $n = 7.10^{10}$. Une technique de réduction de variance sera utile dans ce cas !

Exemple 3 En finance, on est amené à calculer des quantités du type $C = E((e^{\sigma G} - K)_+)$ (un 'call') ou bien $P = E((K - e^{\sigma G})_+)$ (un 'put') avec G une variable aléatoire de loi la gaussienne centrée réduite, et $x_+ = \max(0, x)$.

Description de la méthode de Monte-Carlo

Chapitre 4

Méthodes de réduction de variance

Nous venons de voir que la vitesse de convergence de la méthode Monte-Carlo est de l'ordre de $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$. Pour améliorer cette méthode, il existe de nombreuses techniques, dites de réduction de variance, qui cherchent à diminuer la valeur de σ^2 . L'idée générale de ces méthodes est de donner une autre représentation sous forme d'espérance de la quantité à calculer, c'est à dire : $E(X) = E(Y)$ avec $Var(Y) < Var(X)$.

4.1 Échantillonnage préférentiel

Soit X une variable aléatoire de loi f (sur \mathbb{R} par exemple), et on cherche à calculer $E(g(X)) = \int_{\mathbb{R}} g(x)f(x)dx$.

Soit h une autre loi de probabilité ($h > 0$ et $\int_{\mathbb{R}} h(x)dx = 1$).

Alors on écrit :

$$E(g(X)) = \int_{\mathbb{R}} \frac{g(x)f(x)}{h(x)} h(x)dx = E\left(\frac{g(Y)f(Y)}{h(Y)}\right),$$

avec Y une variable aléatoire de loi h .

En effectuant un tirage de n valeurs Y_1, \dots, Y_n , on approxime $E(g(X))$ par

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{g(Y_i)f(Y_i)}{h(Y_i)}.$$

Si on pose $Z = \frac{g(Y)f(Y)}{h(Y)}$, on a accéléré le calcul si $Var(Z) < Var(X)$.

Si h est choisie aussi proche que possible de $|g(x)f(x)|$ (et ensuite on la normalise), et qu'elle est facilement calculable, on a réduit la variance.

Exemple 4 $\int_0^1 \cos(\frac{\pi x}{2})dx$: on approche le cosinus par un polynôme du second degré $h(x) = \lambda(1 - x^2)$. Par normalisation, $\lambda = \frac{1}{3}$. En calculant les variances (exercice), on voit qu'on a réduit la variance d'un facteur 100.

Exemple 5 $P = E((K - e^{\sigma G})_+)$: $e^x - 1$ est proche de x quand x n'est pas trop grand. On écrit donc : $P = \int \frac{(1-e^{\sigma x})_+}{\sigma|x|} \sigma|x| \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dx$ Par changement de variable, $y = \sqrt{x}$ sur \mathbb{R}^+ et $y = \sqrt{-x}$ sur \mathbb{R}^- , on obtient : $P = \int \frac{(1-e^{\sigma\sqrt{y}})_+ + (1-e^{-\sigma\sqrt{y}})_+}{2\sqrt{y}} \frac{e^{-y/2}}{\sqrt{2\pi}} dy$

Si Y est la variable aléatoire de loi $\frac{e^{-x/2}}{2}$ alors $P = E\left(\frac{(1-e^{\sigma\sqrt{Y}})_+ + (1-e^{-\sigma\sqrt{Y}})_+}{\sqrt{2\pi Y}}\right)$ On passe d'une erreur relative de 6% à 1%.

4.2 Méthode des variables de contrôles

Cette fois-ci, on prend h une fonction voisine de g facilement simulable, pour laquelle $E(h(X))$ est explicite et on écrit :

$$E(g(X)) = E(g(X) - h(X)) + E(h(X))$$

On estime par un calcul Monte-Carlo l'espérance $E(g(X) - h(X))$ et on a une formule directe pour $E(h(X))$. si h est bien choisie, alors $Var(g(X) - h(X)) < Var(g(X))$

Exemple 6

$$\int_0^1 e^x dx = \int_0^1 (e^x - 1 - x) dx + \frac{3}{2}$$

$$\text{en finance : } C - P = E(e^{\sigma G} - K) = e^{\sigma^2/2} - K$$

4.3 Variables antithétiques

Cette méthode consiste, quand on effectue des réalisations X_i de la variable aléatoire x , à associer à X_i , la réalisation $-X_i$. En effet, $I = \int_0^1 f(x) dx = \frac{1}{2} (\int_0^1 (f(x) + f(1-x)) dx)$. Ainsi, $\widetilde{I}_{2n} = \frac{1}{N} (\sum_i = 1^{2N} \frac{1}{2} (f(U_i) + f(1-U_i)))$ au lieu de $I_{2n} = \frac{1}{2N} (\sum_i = 1^{2N} f(U_i))$ Si f est continue, monotone, cette méthode est plus efficace que le Monte-Carlo initial (efficacité 30) Cette idée est généralisable à toute dimension et à toute transformation préservant la loi de la variable aléatoire.

4.4 Méthode de l'échantillonnage stratifié

C'est la méthode qui est utilisée dans les sondages : On cherche à calculer $I = E(g(X)) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x)f(x)dx$, X est ici une variable aléatoire de loi f dans \mathbb{R}^d .

On suppose que l'on dispose d'une partition $(D_i, 1 \leq i \leq m)$ de \mathbb{R}^d . Alors

$$I = \sum_{i=1}^m E(1_{X \in D_i} g(X)) = \sum_{i=1}^m E(g(X)|X \in D_i) P(X \in D_i).$$

Si on connaît les $p_i = P(X \in D_i)$, il reste à calculer les $I_i = E(g(X)|X \in D_i)$ par des méthodes de Monte-Carlo (calcul approché : \tilde{I}_i), ainsi, I sera approché par

$$\tilde{I} = \sum_{i=1}^m p_i \tilde{I}_i$$

On suppose que pour calculer \tilde{I}_i , on effectue n_i tirages, la variance de l'erreur d'approximation est donnée par $\frac{\sigma_i^2}{n_i}$, si on note $\sigma_i^2 = Var(g(X)|X \in D_i)$. La variance du calcul de \tilde{I} vaut alors $\sum_{i=1}^m p_i^2 \frac{\sigma_i^2}{n_i}$. Si on pose $n = \sum_{i=1}^m n_i$. On peut vérifier que les n_i qui minimise la variance de \tilde{I} sont donnés par : $n_i = n \frac{p_i \sigma_i}{\sum_{i=1}^m p_i \sigma_i}$, et le minimum de la variance est alors $\frac{1}{n} (\sum_{i=1}^m p_i \sigma_i)^2$. On peut montrer que cette variance est inférieure à la variance qu'on obtiendrait en effectuant n tirages aléatoires par la méthode de Monte-Carlo :

$$Var(g(X)) \geq \sum_{i=1}^m p_i Var(g(X)|X \in D_i) \geq (\sum_{i=1}^m p_i \sigma_i)^2$$

Chapitre 5

Méthode de Monte-Carlo pour les équations de transport

5.1 Introduction

Nous allons présenter la méthode de Monte-Carlo pour la résolution numérique de quelques équations aux dérivées partielles (pour lesquelles il existe une représentation probabiliste de la solution), ce qui est le cas des équations de transport.

Les méthodes de Monte-Carlo ont souvent mauvaise presse (convergence lente, peu fiable car résultat bruité). Il convient de les utiliser quand on ne dispose pas d'autre méthode numérique efficace (grande dimension de l'espace des phases, équations aux dérivées partielles avec terme intégral ou intégral-différentiel,...).

De plus, il est toujours possible de contrôler la fiabilité du résultat obtenu (intervalle de confiance). Enfin, la loi forte des grands nombres permet d'assurer la convergence de la méthode.

Cadre théorique : résolution de l'équation de transport.

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f(t, x, v) = \int k(v', v) f(t, x, v') dv' - \beta(|v|) f(t, x, v) \quad (5.1)$$

avec $x \in X \subset \mathbb{R}^3$, $v \in V$ (si $V = \mathbb{R}^3$ on résout le transport des neutrons, si $V = S^2$ on résout le transport des photons). Par exemple, en transport des photons, on traite l'équation (simplifiée)

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f(t, x, v) = \int f(t, x, v') dv' - f(t, x, v)$$

On parle de méthode particulière lorsque l'on cherche à résoudre des équations d'advection (équations de Vlasov) du type $\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (af) = 0$.

On parle de méthode de Monte-Carlo lorsque l'on cherche à résoudre des équations de transport avec terme de collision, ou bien les équations de type Boltzmann.

5.2 Description d'une méthode particulière

Se donner une description particulière de la densité $f(t, x, v)$ c'est l'approcher par une combinaison linéaire de masse de Dirac

$$f(t, x, v) = \sum_{i=1}^N a_i(t) \delta_{x_i(t)} \delta_{v_i(t)}$$

La mesure $a_i(t) \delta_{x_i(t)} \delta_{v_i(t)}$ est appelée “particule numérique”, a_i étant le poids numérique ou représentativité de la particule numérique, x_i et v_i étant respectivement la position et la vitesse de la particule numérique.

Pour passer de la forme continue à la forme discrétisée, il faut faire un tirage aléatoire des x_i et v_i suivant la loi (à t fixé) $\frac{f(t, x, v) dx dv}{\int \int f(t, x, v) dx dv}$. (voir TD1)

Pour passer de la forme discrétisée à la forme continue, il faut passer par des techniques de convolutions via une fonction de forme régulière (cf TD1).

Remarque 4 *La question se pose des résultats que l'on souhaite visualiser, ou bien des quantités que l'on souhaite déterminer à partir de la fonction f : par exemple, on a besoin de la vitesse moyenne $\int f(t, x, v) v dv$, de quantités moyennées (sur l'espace des vitesses ou des positions), mais non de la fonction elle-même. Dans ces cas-là, il suffit souvent d'effectuer une somme pondérée sur les particules numériques. En effet, grâce à la représentation discrète de la fonction f sous forme de masse de Dirac, la quantité $f(t, x, v) v dv$ se calcule facilement sous la forme de somme : $f(t, x, v) v dv = \sum_{i=1}^N a_i v_i \delta_{x_i}$ qui est une fonction de x que l'on peut représenter spatialement.*

Chaque réalisation du processus $(x_i(t), v_i(t))$ $0 \leq t \leq T$ et $1 \leq i \leq N$ est généré de la façon suivante :

1. Les N particules numériques $(x_i(0), v_i(0))_{1 \leq i \leq N}$ sont tirées indépendamment les unes des autres avec la probabilité $\frac{f_0(x, v) dx dv}{\int \int f_0(x, v) dx dv}$.
2. On fait évoluer les quantités x_i et v_i afin de résoudre l'équation de transport (c'est l'objet de la suite du cours)
3. On reconstruit la fonction f au temps final T , ou bien on calcule des grandeurs moyennes.

(La suite du cours reste à écrire ...)

Chapitre 6

TD1 : Simulation de grandeurs aléatoires

Les méthodes dites de Monte-Carlo consistent en des simulations expérimentales de problèmes mathématiques, dans lesquelles des nombres aléatoires sont utilisés pour trouver une solution qui dans certains cas n'est pas aléatoire.

La première étape lors de l'application de telles méthodes est la construction de nombres aléatoires, vérifiant une loi de distribution donnée (pour représenter la donnée initiale d'un problème par exemple).

Les exercices se feront avec l'outil Matlab. Dans certains exercices, la mention 'pour aller plus loin' correspond à des parties facultatives (réservées aux élèves ayant le plus de facilité avec Matlab).

6.1 La distribution uniforme entre 0 et 1

La distribution de base qu'il faut savoir simuler numériquement est la loi uniforme sur $[0, 1]$. En Matlab, la commande `rand(n)` renvoie une matrice de taille n dont les éléments sont des variables aléatoires de loi la loi uniforme sur $[0, 1]$.

Exercice 1 *Simuler avec Matlab une loi uniforme sur $[0, 1]$: tirer 1000 nombres aléatoires et visualiser-les.*

6.2 La distribution uniforme entre 0 et 1 (suite)

Une suite de variables aléatoires indépendantes uniformes sur $[0 ; 1]$ est réalisée concrètement avec les langages comme Matlab ou C par des appels successifs à un générateur de nombres pseudo-aléatoires. La méthode la plus simple et la plus couramment utilisée est la méthode des congruences linéaires. On génère une suite de nombres entiers compris entre 0 et $m - 1$ de la façon suivante :

$$\begin{aligned}x_0 &= \text{valeur initiale} \in 0, 1, \dots, m - 1 \\x_{n+1} &= (a x_n + b) \text{ (modulo } m)\end{aligned}$$

a, b et m étant des entiers qu'il faut choisir soigneusement si l'on veut que les caractéristiques statistiques de la suite soient satisfaisantes. Le choix suivant est souvent effectué (voir [1])

$$\begin{aligned}a &= 31415821 \\b &= 1 \\m &= 10^8\end{aligned}$$

Cette méthode permet de simuler des entiers pseudo aléatoires entre 0 et $m - 1$, et pour obtenir un nombre réel aléatoire entre 0 et 1, il suffit de diviser l'entier aléatoire par m .

Exercice 2 *Simuler par le procédé décrit ci-dessus une loi uniforme sur $[0, 1]$, en prenant $x_0 = 1$.*

6.3 $\frac{\pi}{4}$ et le quart de cercle

Nous cherchons à déterminer la surface du quart de cercle de rayon 1, c'est-à-dire $\frac{\pi}{4}$.

Considérons un grand nombre N de paires de nombres (r_1, r_2) , tirés au hasard avec une distribution uniforme entre 0 et 1. Chaque paire est représentée en coordonnées cartésiennes par un point à l'intérieur du carré de côté 1. La proportion p de points tels que $r_1^2 + r_2^2 \leq 1$ tend, si $N \rightarrow \infty$, vers la surface du cercle qui vaut $\frac{\pi}{4}$. En pratique, on est limité à un nombre N d'essais fini, donc le résultat n'est qu'une **estimation** de $\frac{\pi}{4}$.

Exercice 3 *Programmer l'algorithme précédent pour en déduire une valeur approchée de $\pi/4$.*

(Pour aller plus loin) : *Réitérer l'expérience précédente pour des N de plus en plus grand. Tracer l'évolution de l'erreur en fonction de N .*

6.4 Tirage aléatoire sur la sphère

On cherche à tirer des points aléatoirement sur la sphère unité de \mathbb{R}^3 (notée S^2). On note $v = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}$ un point de S^2 en coordonnées sphériques, avec $\theta \in [0, \pi[$, $\phi \in [0, 2\pi[$. La loi de cette variable aléatoire est alors $\frac{\sin(\phi)}{4\pi} d\theta d\phi$, (pour le retrouver, il faut écrire $dx dy dz$ en coordonnée sphérique et en considérant que $r = 1$ et normaliser). Donc, il faut tirer θ avec la loi $\frac{\sin(\theta)}{2} d\theta$ et ϕ avec $2\pi d\phi$, soit (pour la justification de la formule, utiliser la proposition 6.5.1) :

$$\begin{aligned}\theta &= \arccos(1 - 2 * c_1) \\ \phi &= 2 * \pi * c_2\end{aligned}$$

où c_1 et c_2 sont uniformément tirés sur $[0, 1]$.

Exercice 4 *Tirer un grand nombre de points sur la sphère. Les afficher et retrouver le dessin d'une sphère.*

6.5 Méthode de simulation directe

6.5.1 Loi uniforme sur $[a, b]$

Si r suit la loi uniforme sur $[0, 1]$, alors $\xi = a + (b - a) * r$ suit la loi uniforme sur $[a, b]$.

Exercice 5 Tirer 1000 nombres avec la loi uniforme sur $[2, 4]$ et visualiser-les.

6.5.2 Méthode directe (ou méthode d'inversion)

Nous nous plaçons dans le cas où les grandeurs à simuler ne suivent pas une loi de distribution uniforme mais une distribution quelconque entre a et b (a et/ou b peuvent être infinis), notée f (que l'on suppose normalisée, c'est à dire $\int f = 1$). On note F la fonction de répartition de f , soit :

$$F(x) = \int_a^x f(u)du$$

Proposition 6.5.1 Si r est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ alors $\xi = F^{-1}(r)$ est une variable aléatoire de fonction de répartition F et de loi f .

Cette proposition permet ainsi d'obtenir analytiquement les formules pour simuler un grand nombre de lois.

Remarque 3 Souvent la distribution f n'est pas normalisée. Il faut penser à la multiplier par une constante afin que $\int_a^b f(x)dx = 1$.

Exercice 6 Retrouver la formule permettant de trouver la loi uniforme sur $[a, b]$ en fonction de la loi uniforme sur $[0, 1]$.

Exercice 7 Simulation d'une loi exponentielle Construire la loi exponentielle de paramètre ρ : $f(x) = 1_{\{x \geq 0\}} \rho e^{\rho x}$.

Exercice 8 Cas particulier : une distribution gaussienne. Soit $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$. L'intégrale de $f(x)$ n'a pas d'expression analytique, on passe alors à deux dimensions puis en coordonnées polaires (ρ, θ) en définissant la loi p suivante :

$$p(x, y)dxdy = f(x) \times f(y)dxdy = \frac{1}{2\sigma^2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right)dxdy$$

$$p(\rho, \theta)\rho d\rho d\theta = \frac{1}{2\sigma^2\pi} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right)\rho d\rho d\theta = \frac{1}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right)\rho d\rho \times \frac{1}{2\pi}d\theta$$

Ainsi, θ suit la loi uniforme sur $[0, 2\pi]$.

La distribution en ρ est $\frac{1}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right)\rho d\rho$, et on va pouvoir inverser sa fonction de répartition :

$$F(\rho) = \int_0^\rho \frac{1}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right)\rho d\rho$$

Par le changement de variable : $u = \rho^2/(2\sigma^2)$

$$F(\rho) = \int_0^{\rho^2/(2\sigma^2)} \exp(-u) du = 1 - \exp(-\rho^2/(2\sigma^2))$$

Soit à inverser $r = 1 - \exp(-\rho^2/(2\sigma^2))$, sachant que r suit une loi uniforme. Donc $\rho = \sqrt{-2\sigma^2 \ln(r)}$. Et ensuite, on retrouve x et y par $x = r \cos(\theta)$ et $y = r \sin(\theta)$, c'est à dire :

Si r_1 et r_2 sont deux nombres aléatoires à distribution uniforme sur $[0, 1]$, x et y à distribution gaussienne sont donnés par :

$$\begin{aligned} x &= \sigma \sqrt{-2 \ln(r_2)} \cos(2\pi r_1) \\ y &= \sigma \sqrt{-2 \ln(r_2)} \sin(2\pi r_1) \end{aligned}$$

Si au final, nous n'avons besoin que d'une variable gaussienne, seul x est calculé. Par contre, on peut montrer que le couple (x, y) forme un couple de variables aléatoires indépendantes, et on peut donc calculer ces deux variables lorsque l'on cherche à simuler de grands nombres de variables gaussiennes.

Exercice 9 (Pour aller plus loin) Simuler une gaussienne de moyenne m et de variance σ (i.e. $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{|x-m|^2}{2\sigma^2})$)

Exercice 10 (Pour aller plus loin) Simulation d'une loi exponentielle : Construire la loi exponentielle de paramètre ρ : $f(x) = 1_{\{x \geq 0\}} \rho e^{-\rho x}$.

6.6 Méthode d'acceptation-rejet

Lorsque l'on ne peut pas inverser la fonction de répartition (même en utilisant les astuces comme pour la distribution gaussienne), on utilise la méthode d'acceptation-rejet (similaire au calcul de π).

Supposons que l'on connaisse une borne M à f , définie sur l'intervalle $[a, b]$:

$$f(x) \leq M$$

Alors, $f(x)/M \leq 1$.

On engendre des nombres aléatoires r_1 à distribution uniforme sur $[a, b]$, et r_2 à distribution uniforme sur $[0, 1]$.

Si dans le carré $[a, b] \times [0, 1]$ le point (r_1, r_2) est 'sous' la courbe $y = f(x)/M$, alors le nombre aléatoire r_1 est gardé, sinon il est rejeté :

- si $r_2 \leq f(r_1)/M$ alors $\xi = r_1$ est le nombre aléatoire cherché.
- si $r_2 > f(r_1)/M$ alors la paire (r_1, r_2) est rejetée.

On recommence cette étape autant que nécessaire afin d'avoir le nombre désiré de nombres aléatoires .

Exercice 11 Construire la distribution $x \mapsto x^2 e^{-x^2}$, $x \in \mathbb{R}$.

Exercice 12 (Pour aller plus loin) Construire la distribution $v \mapsto v^2 e^{-v^2}$, où $v \in \mathbb{R}^3$.

6.7 Reconstruction des distributions (ou lois)

Pour retrouver la loi correspondant à un ensemble de variables aléatoires, nous pouvons utiliser la technique de reconstruction de distribution.

Le passage entre la loi et les variables aléatoires correspond à écrire la loi sous la forme d'une somme de masses de Dirac : Si f est une loi, et $(X_i)_{i=1\dots N}$ les variables aléatoires de loi f , on a approché f par :

$$f \approx \sum_{i=1}^N \delta_{X_i}$$

C'est le passage de la forme continue à la forme discrète.

La reconstruction des distributions correspond au passage de la forme discrète à la forme continue : l'idée est de remplacer les masses de Dirac en X_i par des fonctions plus régulières. Par exemple, on se donne χ fonction régulière à support dans $[-h, h]$, $\chi \geq 0$ et $\int \chi = 1$. On remplace alors les masses de Dirac δ_{X_i} par $\chi(X_i - x)$. Ainsi :

$$f(x) \approx \sum_{i=1}^N \chi(X_i - x)$$

qui se trouve être régulière (aussi régulière que χ).

Exemple 1 *Fonction Chapeau :*

$$\begin{cases} \chi(x) = 0 & \text{pour } |x| \geq h, \\ \chi(x) = \lambda(1 - \frac{|x|}{h}) & \text{sinon.} \end{cases}$$

avec λ choisi de telle manière que $\int_{|x| \leq h} \chi(x) dx = 1$

Par contre, plus la fonction χ sera régulière, plus les calculs de reconstruction de la fonction f seront longs.

La principale difficulté réside dans le choix du paramètre h : il faut qu'un nombre conséquent de points X_i se trouvent dans l'intervalle $[-h, h]$ sans pour autant que la fonction f ne se réduise uniquement à la fonction χ . C'est au cours de la reconstruction que l'on ajuste ce paramètre.

Exercice 13 *Reconstruire toutes les distributions vues précédemment.*

Chapitre 7

TD2 : Calcul d'intégrales et réduction de variance

7.1 Calcul d'intégrale

Le but de l'exercice est d'utiliser la méthode de Monte Carlo pour calculer les intégrales ci-dessous. Pour chaque calcul, on donnera quand c'est possible la valeur théorique de la variance. Puis on donnera la valeur de l'intégrale obtenue (à comparer avec la valeur exacte quand c'est possible), et l'intervalle de confiance à 95% (en se basant sur un estimateur de la variance) pour $N = 100; 1000; 10000; \dots$

- $I = \int_0^1 e^x dx$
- $I = E(\exp(\beta g)) = e^{\beta^2/2}$ où g est une gaussienne centrée réduite.
- Application à la finance : prix d'une option d'achat (ou call en anglais)

$$C = E((e^{\sigma G} - K)_+)$$

et le prix d'une option de vente (put)

$$P = E((K - e^{\sigma G})_+)$$

où G est une gaussienne centrée réduite. On prendra $\sigma = K = 1$.

Les valeurs exactes sont données par la formule explicite due à Black et Scholes

$$C = e^{(\frac{\sigma^2}{2})} N\left(\sigma - \frac{\log(K)}{\sigma}\right) - K N\left(-\frac{\log(K)}{\sigma}\right)$$

avec $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{u^2/2} du$.

Pour laquelle de ces 2 quantités (entre C et P) la méthode de Monte-Carlo sera la plus efficace ?

7.2 Réduction de variance

Appliquer sur chacun des calculs précédents les différentes méthodes de réduction de variances, et montrer de combien on diminue la variance dans chaque cas.

- Echantillonnage préférentiel

TD2 : Calcul d'intégrales et réduction de variance

- Méthode utilisant des variables de contrôle
- Variables antithétiques
- Méthode d'échantillonnage stratifié

Chapitre 8

TD3 : Simulation numérique du transport pur

On cherche à résoudre numériquement l'équation de transport pur suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad t \in [0, T]$$

avec pour donnée initiale $f_0(x, v)$ une fonction connue et avec $x \in \mathbb{R}, v \in S^2$ la sphère unité de \mathbb{R}^3 (et v_x la première composante de v).

Exercice 1 Construire un programme qui :

- initialise N particules à partir d'une fonction f_0 choisie (par exemple : distribution uniforme sur $[-1, 1]$, gaussienne en x ou enfin distribution uniforme sur la sphère en v).
- calcule aux temps $t^n = n\Delta t$ (Δt étant le pas de temps, par exemple $\Delta t = T/50$), les nouvelles valeurs des positions des particules.
- en fin de calcul ($t=T$), reconstruit la distribution en x (c'est à dire la fonction $x \mapsto \int f(T, x, v)dv$). La comparer avec la distribution à $t = 0$.

Exercice 2 Quelle équation vérifie $\bar{v}(t) = \int_x \int_v v f(t, x, v)dvdx$. Vérifiez-le sur votre programme de simulation.

Exercice 3 Conditions aux bords : On se place dans le cas où le transport s'effectue dans un domaine borné, par exemple $x \in [-1, 1]$. La normale extérieure $n(x)$ est alors : si $x = 1, n(x) = (1, 0, 0)$ et si $x = -1, n(x) = (-1, 0, 0)$. Les conditions aux bords possibles sont

- Condition de réflexion spéculaire si $v \cdot n < 0$ $f(t, x, v) = f\left(t, x, v - 2(v \cdot n(x))n(x)\right)$
- Condition périodique Si $v \cdot n(x) < 0$ $f(t, x, v) = f(t, -x, v)$

Comment cela s'exprime-t-il dans votre code par rapport aux particules numériques ? Programmez ces conditions et testez-les.

Chapitre 9

TD4 : Simulation numérique du transport avec collision

9.1 Équation du transport avec collision

On cherche à résoudre numériquement la partie collision de l'équation de transport :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f = \sigma \int_{v' \in S^2} f(t, x, v') dv' - \sigma f(t, x, v), \quad t \in [0, T]$$

avec pour donnée initiale $f_0(x, v)$, une fonction connue, et avec $x \in \mathbb{R}$, $v \in S^2$.

Grâce à la technique du splitting, cette étape s'insère à la suite de la résolution du transport pur (ou transport libre). Cela revient à :

- Initialisation des particules numériques : création des tableaux contenant les $(x_i)_{i=1..N}$, et les $((v_1)_i, (v_2)_i, (v_3)_i)_{i=1..N}$.
- Tous les $n\Delta t$:
 - **Résolution de $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{t}} - \mathbf{v}_1 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0}$** : faire évoluer les positions de chaque particule en résolvant $\frac{dx_i}{dt} = (v_1)_i$.
 - **Résolution de $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{t}} = \sigma \int f(v') dv' - \sigma f$** : faire collisionner chaque particule avec la probabilité $\sigma \Delta t$. Sa nouvelle vitesse sera tirée aléatoirement dans la sphère unité ($\|v'\| = 1$).
- au temps T, faire la reconstruction de la fonction $x \rightarrow \int f(T, x, v) dv$

Attention, la condition de type cfl sur le pas de temps sera : $\sigma \Delta t \ll 1$ (on prendra par exemple $\Delta t = \frac{0.1}{\sigma}$).

Exercice 1 Intégrer la résolution des collisions dans le programme du td de résolution du transport pur. On prendra $\sigma = 1$.

Exercice 2 Quelle équation vérifie $\bar{v}(t) = \int_x \int_v v f(t, x, v) dv dx$. Vérifiez-le sur votre programme de simulation. (Pour cela, on pourra calculer la valeur numérique de \bar{v}_1 , c'est-à-dire $\sum_{i=1}^N (v_1)_i$ à tous les pas de temps et tracer le résultat en fonction du temps.)

Accélération du code

La méthode numérique précédente effectue N opérations par pas de temps (N=nombre de particules). Si ce nombre est grand, le calcul devient coûteux. On sait que pendant

Δt chaque particule collisionne avec la probabilité $\sigma \Delta t$. Donc, comme il y a N particules, il y aura en probabilité $N\sigma \Delta t$ particules qui vont collisionner durant Δt . L'idée qui va accélérer le programme c'est de se donner à chaque pas de temps et de manière aléatoire $N\sigma \Delta t$ (ou l'entier le plus proche) particules et de faire collisionner ces particules et seulement celles-ci.

Exercice 3 Programmer cette méthode pour accélérer le programme. Comparer les résultats avec ceux obtenus précédemment, et comparer la vitesse de calcul.

Exercice 4 Rajouter de l'absorption à l'équation de transport (terme $\sigma_a f$) et à la simulation numérique.

9.2 L'approximation de la diffusion

Le but de cette section est de vérifier numériquement que l'équation de transport, dans un milieu très collisionnel, dérive vers une équation de diffusion.

Exercice 5 Modifier le programme pour résoudre l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(t, x, v) + \frac{v}{\varepsilon} \cdot \nabla_x f = \frac{\sigma}{\varepsilon^2} \left(\int_{v' \in \mathbb{S}^2} f(t, x, v') dv' - f(t, x, v) \right), \quad t \in [0, T]$$

Exercice 6 Résoudre avec une méthode de type différences finies l'équation de diffusion suivante en 1D :

$$\partial_t u - \operatorname{div} \left(\frac{1}{3\sigma} u \right) = 0$$

Exercice 7 Montrer que la solution numérique de l'équation de transport se rapproche de la solution numérique de la diffusion quand ε tend vers 0.

9.3 L'équation de Boltzmann

Le but de cette section est de simuler l'équation de Boltzmann dans le cas particulier de sections efficaces simples.

On cherche donc à résoudre l'équation

$$\partial_t f = Q_{\text{coll}}(f, f) = \int_{v_* \in \mathbb{R}^3} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} (f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)) \frac{\sin(\theta)}{2} d\theta \frac{d\phi}{2\pi} dv_*$$

avec

$$v' = (v + v_*) + \frac{|v - v_*|}{2} \sigma \quad (9.1)$$

$$v'_* = (v + v_*) - \frac{|v - v_*|}{2} \sigma \quad (9.2)$$

avec le vecteur unitaire de \mathbb{R}^3 σ paramétré par les angles (θ, φ) , $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, 2\pi]$.

Dans ce cas précis, on sait que si la donnée initiale est $f(0, v) = \frac{2}{3\pi\sqrt{\pi}} |v|^2 e^{-|v|^2}$ pour $v \in \mathbb{R}^3$, alors la solution est de la forme : $f(t, v) = (a(t) + b(t)|v|^2) e^{-c(t)|v|^2}$.

TD4 : Simulation numérique du transport avec collision

Exercice 8 *Construire un programme qui résout avec une méthode de type Bird l'équation de Boltzmann homogène ci-dessus, avec la donnée initiale ci-dessus.*

Exercice 9 *Montrer que les fonctions a , b et c vérifient*

$$\begin{aligned} - a(t) &= \frac{5}{2} \left(\frac{c(t)}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} (1 - c(t)) \\ - b(t) &= c(t) \left(\frac{c(t)}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{5c(t)}{2} - 1 \right) \\ - c(t) &= \frac{5}{5 - 2e^{-\frac{t}{6}}} \end{aligned}$$

et calculer le moment d'ordre 4 de la solution f

Exercice 10 *Comparer les moments théorique et numérique de la fonction f .*

Bibliographie

- [1] B. Lapeyre, E. Pardoux R. Sentis, *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*, Springer, 1998
- [2] D. Foata, A. Fuchs, *Calcul des probabilités*, Dunod