

Modélisation par équations aux dérivées partielles

Chapitre 4 : Méthode de Monte-Carlo pour la résolution des edp linéaires paraboliques

Philippe Villedieu

Philippe.villedieu@insa-toulouse.fr

1. Introduction
2. Définition formelle du mouvement brownien
3. Processus de dérive-diffusion et EDP linéaires paraboliques
4. Principe de la méthode de Monte-Carlo

1. Introduction

2. Définition formelle du mouvement brownien

3. Processus de dérive-diffusion et EDP linéaires paraboliques

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo

1. Introduction

L'objectif de ce chapitre est d'exposer le principe de la méthode de Monte-Carlo pour la résolution numérique des edp de la forme suivante:

$$(1.1) \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T - D \Delta T = f$$

où

- ✓ \mathbf{v} est un champ de vecteurs régulier tel que: (1.2) $\operatorname{div}(\mathbf{v})=0$
- ✓ D est une constante réelle > 0

La méthode de Monte-Carlo pour résoudre (1) repose sur le fait que la solution (associée à des conditions initiale et aux limites données) peut s'écrire sous la forme d'une espérance conditionnelle. Plus précisément on montrera qu'il existe deux processus aléatoires continus \mathbf{X}_t et θ_t tels que:

$$(1.3) \quad T(t, \mathbf{x}) = \mathbb{E}(\theta_t | \mathbf{X}_t = \mathbf{x})$$

1. Introduction

Or (d'après la loi faible des grand nombres) on sait que pour une VA réelle X possédant une espérance, la VA \bar{X}_n définie par la moyenne empirique :

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N X_k$$

où les X_k sont des VA indépendantes et de même loi que X , converge en probabilité vers $\mathbb{E}(X)$ c'est-à-dire que pour tout $\varepsilon > 0$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}(|\mathbb{E}(X) - \bar{X}_N| > \varepsilon) = 0$$

En combinant ce résultat avec (1.3), on peut donc écrire (au sens de la convergence en probabilité) que pour N grand:

$$(1.4) \quad T(t, \mathbf{x}) \approx \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \theta_k$$

à condition que les θ_k sont des VA indépendantes et de même loi que θ_t conditionnée par l'événement $(\mathbf{X}_t = \mathbf{x})$.

1. Introduction

D'après le théorème Centrale-Limite, on sait de plus que si X possède une variance σ^2 alors l'erreur d'estimation $E_N = \mathbb{E}(X) - \bar{X}_N$ vérifie :

$$\sqrt{N}E_N \xrightarrow{\text{loi}} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Pour N grand, l'erreur E_N d'une méthode de Monte-Carlo se distribue donc selon une loi normale centrée d'écart type $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$.

Il est intéressant de noter que l'ordre de grandeur de l'erreur ne dépend de la dimension d de la variable d'espace \mathbf{x} qu'à travers la constante σ^2 .

Pour une méthode de différences finies d'ordre 2 par exemple, l'erreur d'estimation est de l'ordre de h^2 (h étant le pas de maillage) et donc de l'ordre de $N^{-2/d}$ où N désigne le nombre de noeuds du maillage.

A coût de calcul fixé (proportionnel à N dans les deux cas), la précision d'une méthode de Monte-Carlo peut donc être meilleure que celle d'une méthode de Différences Finies à condition que d soit grand. C'est l'un des avantages des méthodes de Monte-Carlo.

1. Introduction

Pour définir une méthode de Monte-Carlo pour résoudre numériquement l'edp (1), il va nous falloir :

- ✓ définir les processus \mathbf{X}_t et θ_t associé à (1),
- ✓ démontrer la formule (1.2),
- ✓ proposer un algorithme pour générer des VA indépendantes de même loi que θ_t conditionnée par l'événement $(\mathbf{X}_t = \mathbf{x})$.

Pour construire le processus \mathbf{X}_t , nous allons d'abord devoir introduire un processus fondamental en Mathématique et en Physique appelé **mouvement brownien** sur \mathbb{R}^d .

1. Introduction

2. Définition formelle du mouvement brownien

3. Processus de dérive-diffusion et EDP linéaires
paraboliques

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo

2. Mouvement Brownien discret sur \mathbb{R}

Soit Δt un réel > 0 et soit $(B_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de VA réelles définies par la relation de récurrence suivante:

$$(2.1) \quad B_{n+1} = B_n + \sqrt{\Delta t} \theta_n$$

où par définition :

- $B_0 = 0$,
- les θ_n sont des VA gaussiennes centrées réduites – c-à-d de loi $\mathcal{N}(0,1)$ - indépendantes deux à deux.

Un tel processus est appelé **mouvement brownien discret sur \mathbb{R}** . C'est un cas particulier de processus discret à accroissements indépendants.

Par construction, on a pour tout couple (n,m) avec $m > n$:
$$B_m - B_n = \sqrt{\Delta t} \sum_{k=1}^{m-n} \theta_{k+n}$$

Comme somme de VA Gaussiennes centrées i.d.d., $B_m - B_n$ est également une VA gaussienne centrée de variance la somme des variances c-à-d $(m - n)\Delta t$. On a donc :

$$(2.2) \quad B_m - B_n \sim \mathcal{N}(0, (m - n)\Delta t)$$

De plus, par construction, $B_m - B_n$ est indépendante de B_k pour tout $k \leq n$.

2. Mouvement Brownien sur \mathbb{R}

On peut associer au processus discret $(B_n)_{n \in \mathbb{N}}$ un processus $(B_t^{\Delta t})_{t \in \mathbb{R}^+}$, continu à droite par rapport à la variable t , défini par :

$$B_t^{\Delta t} = B_n \text{ pour tout } t \in [n\Delta t, (n+1)\Delta t[$$

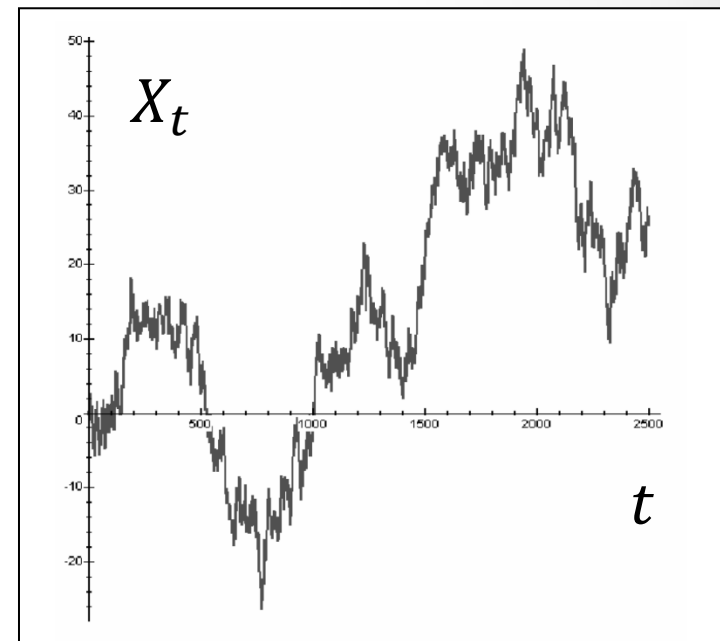
On peut ensuite faire tendre vers 0 le pas de temps Δt et étudier la limite du processus $B_t^{\Delta t}$. On admettra que cette limite existe et on la notera B_t . B_t est appelé **mouvement Brownien sur \mathbb{R}** .

On admettra également que B_t vérifie les propriétés suivantes (héritées de celles du processus discret B_n):

- (i) $B_0 = 0$
- (ii) Pour tout $t > s > 0$, $B_t - B_s$ est indépendante de $(B_u)_{0 \leq u \leq s}$
- (iii) $B_t - B_s \sim \mathcal{N}(0, t - s)$
- (iv) B_t est continu c-à-d que pour toute réalisation ω , la fonction $t \rightarrow B_t(\omega)$ est continue.

2. Mouvement Brownien sur \mathbb{R}

- Par définition, les propriétés (i), (ii), (iii) et (iv) caractérisent un mouvement brownien. Il suffit donc de les vérifier pour prouver qu'un processus est un mouvement brownien.
- En raison du théorème Centrale Limite, le mouvement brownien joue un rôle fondamental en Mathématique et en Physique. On peut montrer (voir TD2) que toute marche au hasard sur \mathbb{R} ressemble à un mouvement brownien pourvu qu'on la “regarde de suffisamment loin”.
- Soit $dB_t \stackrel{\text{def}}{=} B_{t+dt} - B_t$. Puisque:
 $dB_t \sim \mathcal{N}(0, dt)$, on a formellement $dB_t = O(\sqrt{dt})$ et donc $\frac{dB_t}{dt} = O\left(\frac{1}{\sqrt{dt}}\right)$, ce qui prouve formellement que pour (presque toute) réalisation ω la fonction $t \rightarrow B_t(\omega)$ est continue mais nulle part dérivable !



Exemple de réalisation du mouvement brownien sur \mathbb{R}

2. Mouvement Brownien sur \mathbb{R}

- La terminologie mouvement brownien vient du nom du botaniste anglais Robert Brown qui en 1827 aperçut avec un microscope de très petites particules agitées de mouvements apparemment chaotiques, dans le fluide situé à l'intérieur des grains de pollen de la *Clarkia pulchella*.
- C'est Albert Einstein qui le premier en donne une description quantitative en 1905 et fournit ainsi une preuve de la théorie moléculaire de la chaleur et une manière indirecte de mesurer le nombre d'Avogadro (expériences réalisées ensuite par le français Jean Perrin qui lui valurent le prix Nobel de Physique) <http://materiel-physique.ens-lyon.fr/Logiciels/CD%20N%C2%B0%203%20BUP%20DOC%20V%204.0/Disk%202/TEXTES/1981/06341123.PDF>
- La première définition mathématique rigoureuse du mouvement brownien est due à Norbert Wiener en 1923, d'où le nom de processus de Wiener également utilisé pour désigner un mouvement brownien.

2. Mouvement Brownien sur \mathbb{R}^d

- **Définition 1** : on dit que le processus $(\mathbf{B}_t)_{t \geq 0}$ à valeur dans \mathbb{R}^d est un **mouvement brownien standard** sur \mathbb{R}^d si
 - ✓ chacune de ses composantes est un mouvement brownien sur \mathbb{R}
 - ✓ ses composantes sont indépendantes deux à deux.

- Par définition, si $(\mathbf{B}_t)_{t \geq 0}$ est un mouvement brownien standard alors, pour tout $t \geq 0$ et pour tout $s \geq t$:
 - ✓ \mathbf{B}_t est un vecteur gaussien centré de matrice de covariance $t \mathbf{I}$,
 - ✓ $\mathbf{B}_s - \mathbf{B}_t$ est un vecteur gaussien centré, de matrice de covariance $(s - t)\mathbf{I}$, et indépendant de $(\mathbf{B}_u)_{0 \leq u \leq t}$.

- **Définition 2** : si $(\mathbf{B}_t)_{t \geq 0}$ est un mouvement brownien standard et si \mathbf{M} est une matrice de $\mathbb{R}^{d \times d}$ alors le processus $\mathbf{B}'_t = \mathbf{M} \mathbf{B}_t$ est appelé mouvement brownien sur \mathbb{R}^d . La matrice de covariance de \mathbf{B}'_t est la matrice $\mathbf{M}^t \mathbf{M}$.

Dans la suite nous ne considérerons que des mouvements browniens standards.

2. Mouvement Brownien sur \mathbb{R}^d

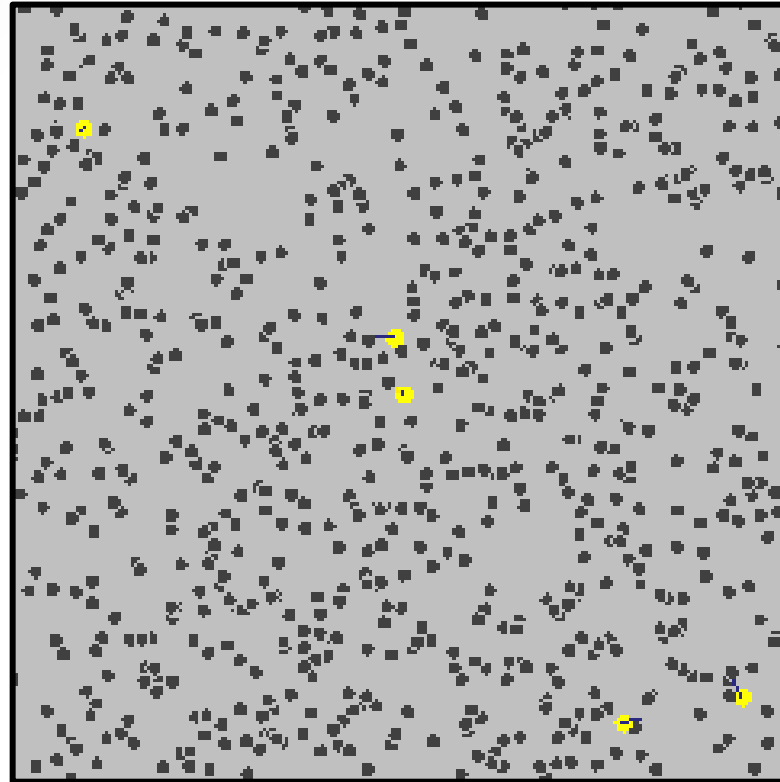


Illustration du mouvement brownien sur \mathbb{R}^2 . Les 5 particules marquées en jaune ont un mouvement qui ressemble fortement à un mouvement brownien en raison des chocs aléatoires qu'elles subissent en permanence avec les autres particules. (Source: wikipedia)

Plan

1. Introduction
2. Définition formelle du mouvement brownien
- 3. Processus de dérive-diffusion et EDP linéaires paraboliques**
4. Principe de la méthode de Monte-Carlo

3. Processus de dérive-diffusion discret

On appellera **processus de dérive-diffusion discret** sur \mathbb{R}^d un processus discret $(\mathbf{X}_n)_{n \in \mathbb{N}}$ vérifiant une relation de récurrence de la forme suivante :

$$(3.1) \quad \mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \underbrace{\mathbf{b}(t_n, \mathbf{X}_n) \Delta t}_{\text{Terme de dérive}} + \underbrace{\sqrt{\Delta t} \, \Lambda \, \boldsymbol{\theta}_n}_{\text{Terme de diffusion}}$$

où :

- \mathbf{X}_0 est un vecteur aléatoire de \mathbb{R}^d
- $t_n = n \Delta t$
- les $\boldsymbol{\theta}_n$ sont des vecteurs aléatoires gaussiens centrés, de matrice de covariance la matrice identité de $\mathbb{R}^{d \times d}$, et indépendants deux à deux.
- $(t, \mathbf{X}) \rightarrow \mathbf{b}(t, \mathbf{X})$ est une fonction régulière $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d$ (au moins C^1)
- Λ est une matrice de $\mathbb{R}^{d \times d}$ à coefficients constants.

NB: L'hypothèse Λ matrice à coefficients constants n'est pas nécessaire mais elle est suffisante dans le cadre de ce cours pour traiter le cas de l'edp (1.1) avec D constant.

3. Processus de dérive-diffusion discret

- Si $\Lambda = \mathbf{0}$, (3.1) n'est autre que le schéma d'Euler explicite pour résoudre le système différentiel : $\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{b}(t, \mathbf{X})$. Dans ce cas, les valeurs de la suite \mathbf{X}_n sont totalement déterministes (une fois \mathbf{X}_0 fixée) et correspondent aux positions successives d'un point mobile de vitesse $\mathbf{b}(t_n, \mathbf{X}_n)$ sur chaque intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$. **Ce mouvement, associé au champ de vitesse \mathbf{b} , est appelé mouvement de dérive.**
- Si $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, (3.1) modélise un mouvement brownien discret sur \mathbb{R}^d de matrice de covariance $\Lambda^t \Lambda$. Les coefficients de la matrice Λ fixent l'amplitude du mouvement dans chacune des directions de l'espace. Si Λ n'est pas de la forme $\Lambda = \lambda \mathbf{I}$, le mouvement est anisotrope. **Ce mouvement aléatoire est appelé, par analogie avec la Physique, mouvement de diffusion.** On verra qu'à l'échelle macroscopique, il correspond effectivement à un phénomène de diffusion.
- Dans le cas général (3.1) modélise donc une marche aléatoire discrète sur \mathbb{R}^d résultant de la surperposition d'un mouvement brownien discret et d'un mouvement de dérive déterministe.

3. Processus de dérive diffusion continu

Comme on l'a fait pour le mouvement brownien discret, on peut formellement passer à la limite quand Δt tend vers 0 et construire ainsi un processus continu, noté \mathbf{X}_t , vérifiant l'équation différentielle suivante (appelée équation différentielle stochastique):

$$(3.2) \quad d\mathbf{X}_t = \mathbf{b}(t, \mathbf{X}_t) dt + \Lambda d\mathbf{B}_t$$

où :

- \mathbf{B}_t est un mouvement brownien standard sur \mathbb{R}^d
- \mathbf{X}_0 est un vecteur aléatoire de \mathbb{R}^d
- $(t, \mathbf{X}) \rightarrow \mathbf{b}(t, \mathbf{X})$ est une fonction régulière sur $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d$
- Λ est une matrice de $\mathbb{R}^{d \times d}$ à coefficients constants ≥ 0 .

Nota: \mathbf{B}_t étant non différentiable par rapport à t , \mathbf{X}_t solution de (3.2) ne l'est pas non plus. L'équation (3.2) est une écriture formelle pour signifier que \mathbf{X}_t est en fait solution de l'équation intégral-différentielle :

$$(3.3) \quad \mathbf{X}_t = \mathbf{X}_0 + \int_0^t \mathbf{b}(s, \mathbf{X}_s) ds + \Lambda \mathbf{B}_t$$

3. Equation de Kolmogorov associée à un processus de dérive – diffusion

Nous allons maintenant énoncer un théorème dû à Kolmogorov qui permet de faire le lien entre processus de dérive-diffusion et équation aux dérivées partielles de convection-diffusion.

Soit \mathbf{X}_t un processus de dérive-diffusion. On note $p_X(t, \mathbf{x})$ sa densité de probabilité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Par définition :

$$P(\mathbf{X}_t \in Q) = \int_Q p_X(t, \mathbf{x}) \, dx_1 \dots dx_d$$

Théorème (Kolmogorov). Soit $\mathbf{K} = \mathbf{\Lambda}^t \mathbf{\Lambda}$ la matrice de covariance du mouvement brownien associé à l'équation (2). Si \mathbf{X}_t vérifie (2) alors p_X est solution de l'edp:

$$(3.4) \quad \frac{\partial p_X}{\partial t} + \sum_{i=1 \dots d} \frac{\partial(p_X b_i)}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1 \dots d} K_{ij} \frac{\partial^2 p_X}{\partial x_i \partial x_j} = 0$$

avec pour condition initiale $p_X(0, \cdot) = p_0(\cdot)$ où p_0 est la densité de la VA \mathbf{X}_0 .

Nota: l'équation (3.4) est appelée équation de Fokker-Planck associée à la densité p_X .

Plan

1. Introduction
2. Définition formelle du mouvement brownien
3. Processus de dérive-diffusion et EDP linéaires paraboliques
4. Principe de la méthode de Monte-Carlo

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

Considérons le processus de dérive-diffusion sur \mathbb{R}^3 défini de la façon suivante:

$$\mathbf{Z}_t = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_t \\ \theta_t \end{pmatrix} \quad \text{où } \mathbf{X}_t \in \mathbb{R}^2, \theta_t \in \mathbb{R}$$

avec :

$$(4.1) \quad d\mathbf{X}_t = \mathbf{v}(t, \mathbf{X}_t)dt + \sqrt{2D}d\mathbf{B}_t$$

$$(4.2) \quad d\theta_t = f(t, \mathbf{X}_t)dt$$

où \mathbf{B}_t est un mouvement brownien standard sur \mathbb{R}^2 . Le processus par défini (4.1) & (4.2) vérifie la définition (3.2) d'un processus de dérive-diffusion sur \mathbb{R}^3 avec :

$$\mathbf{b}(t, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) \\ f(t, \mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \sqrt{2D} & \mathbf{0} & 0 \\ \mathbf{0} & \sqrt{2D} & 0 \\ \mathbf{0} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

4. Processus de dérive – diffusion associé à l’edp initiale

Physiquement on peut donner l’interprétation suivante du système (4.1)-(4.2) :

- (4.1) modélise l’équation d’une particule se déplaçant aléatoirement tout en étant entraînée par un courant de vitesse \mathbf{v}
- (4.2) désigne l’équation d’évolution de la température de cette particule, $f(t, \mathbf{x})$ représentant la source de chaleur au point \mathbf{x} à l’instant t .

Dans le cadre de ce modèle, la température “macroscopique” $T(t, \mathbf{x})$ solution de l’edp (1.1) doit être interprétée comme la moyenne des températures de toutes les particules (indépendantes les unes des autres) situées dans le voisinage immédiat du point \mathbf{x} à l’instant t ou bien (ce qui revient au même d’après la loi des grands nombres) comme l’espérance conditionnelle de la température d’une particule située en \mathbf{x} à l’instant t .

On s’attend donc à ce que $\mathbb{E}(\theta_t | \mathbf{X}_t = \mathbf{x})$ vérifie l’edp (1.1). C’est ce que nous allons démontrer.

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

D'après le théorème de Kolmogorov, l'équation vérifiée par la densité du processus \mathbf{Z}_t est la suivante:

$$(4.3) \quad \frac{\partial p_Z}{\partial t} + \frac{\partial(p_Z v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(p_Z v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(p_Z f)}{\partial \theta} - D \frac{\partial^2 p_Z}{\partial x^2} - D \frac{\partial^2 p_Z}{\partial y^2} = 0$$

Notons p_X la loi du processus \mathbf{X}_t . Par définition on a :

$$(4.4) \quad p_X(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}} p_Z(t, \mathbf{x}, \theta) d\theta$$

De plus posons:

$$(4.5) \quad T(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{p_X(t, \mathbf{x})} \int_{\mathbb{R}} \theta p_Z(t, \mathbf{x}, \theta) d\theta \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}(\theta_t | \mathbf{X}_t = \mathbf{x})$$

Il nous faut démontrer que T définie par (4.5) vérifie l'edp (1.1).

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

Intégrons l'équation (4.3) par rapport à la variable θ . En admettant que l'on peut faire commuter dérivées partielles par rapport à t , x et y et intégrale par rapport à θ et que $p_Z(t, \mathbf{x}, \theta)$ est nulle pour $|\theta|$ suffisamment grand*, on en déduit que p_X vérifie l'edp :

$$(4.6) \quad \frac{\partial p_X}{\partial t} + \frac{\partial(p_X v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(p_X v_y)}{\partial y} - D \frac{\partial^2 p_X}{\partial x^2} - D \frac{\partial^2 p_X}{\partial y^2} = 0$$

qui en se servant de (1.2) est équivalente à:

$$(4.7) \quad \frac{\partial p_X}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p_X - D \Delta p_X = 0$$

Nota: l'équation (4.6) peut aussi être obtenue directement en appliquant le théorème de Kolmogorov au processus X_t .

* On montrera rigoureusement cette propriété un peu plus loin (slide 35)

4. Processus de dérive – diffusion associé à l’edp initiale

- Il nous faut maintenant tenir compte du fait que **le domaine Ω sur lequel est posée l’edp (1.1) est un domaine borné de \mathbb{R}^2 .**
- L’équation du mouvement des particules (4.1) doit donc être légèrement modifiée **afin d’imposer aux particules de rester dans le domaine Ω** que l’on peut voir physiquement comme une cavité fermée au sein de laquelle circule un fluide.
- Tout d’abord, on rajoute l’hypothèse :
$$(4.8) \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) = 0, \text{ pour tout } \mathbf{x} \in \Omega$$

qui exprime le fait la vitesse du courant qui entraine les particules ne peut avoir qu’une composante tangentielle sur le bord de Ω (le fluide ne peut pas traverser $\partial\Omega$)
- Il faut également **modifier la définition du mouvement Brownien** afin d’imposer qu’à la manière d’un rayon lumineux, **les particules sont “réfléchies” par la frontière de Ω .**

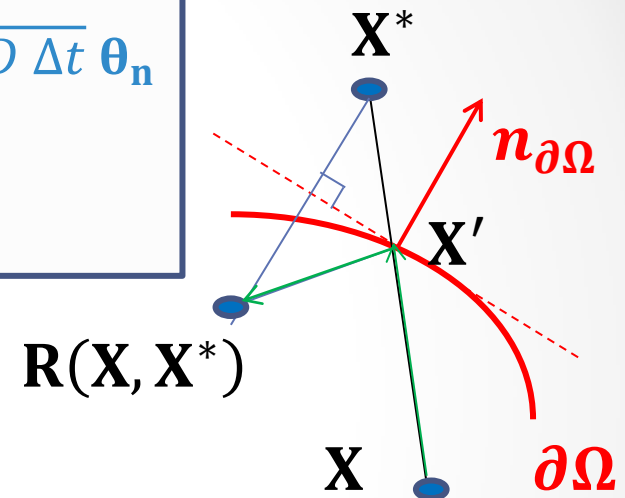
4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

Au niveau discret cela revient à remplacer (3.1) par:

$$(4.9a) \quad \mathbf{X}_{n+1}^* = \mathbf{X}_n + \mathbf{v}(t_n, \mathbf{X}_n) \Delta t + \sqrt{2D \Delta t} \boldsymbol{\theta}_n$$

$$(4.9b) \quad \mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{R}(\mathbf{X}_n, \mathbf{X}_{n+1}^*)$$

où \mathbf{R} est l'opérateur de réflexion spéculaire défini par :



$$\mathbf{R}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^*) = \mathbf{X}^* \text{ si } [\mathbf{X}, \mathbf{X}^*] \cap \partial\Omega = \emptyset$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^*) = \mathbf{X}^* - 2 (\mathbf{X}^* - \mathbf{X}') \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} \text{ si } [\mathbf{X}, \mathbf{X}^*] \cap \partial\Omega = \mathbf{X}'$$

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

- Au niveau continu (c'est-à-dire en passant formellement à la limite dans (4.9)), on admettra que cela revient à remplacer (4.1) par:

$$(4.10) \quad d\mathbf{X}_t = \mathbf{v}(t, \mathbf{X}_t) dt + \Lambda d\mathbf{B}_t^*$$

où \mathbf{B}_t^* est un mouvement Brownien modifié avec réflexion spéculaire sur $\partial\Omega$.

- On admettra que les edp (4.3) et (4.7) vérifiées par p_X et p_Z ne sont pas changées (ce qui est intuitif puisque l'équation pour $d\mathbf{X}_t$ n'est modifiée qu'au voisinage de la frontière)
- Le passage de (4.1) à (4.10) a par contre une influence directe sur la condition aux limites (CL) vérifiée par p_X sur $\partial\Omega$. On admettra qu'il s'agit d'une **condition de Neumann homogène**:

$$(4.11) \quad \nabla p_X(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) = 0, \text{ pour tout } \mathbf{x} \in \partial\Omega$$

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

Il est intéressant de noter que puisque p_X est une densité de probabilité, elle doit vérifier par définition pour tout instant t :

$$\int_{\Omega} p_X(t, \mathbf{x}) \, dx dy = 1$$

et donc:

$$(4.12) \quad \frac{d}{dt} \int_{\Omega} p_X(t, \mathbf{x}) \, dx dy = 0$$

Or en intégrant l'équation (4.6) sur Ω , on obtient en se servant de la formule d'Ostrogradsky :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} p_X(t, \mathbf{x}) \, dx dy = - \underbrace{\int_{\partial\Omega} p_X(t, \mathbf{x}) \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) \, ds}_{\text{Flux convectif}} + D \underbrace{\int_{\partial\Omega} \nabla p_X(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) \, ds}_{\text{Flux diffusif}}$$

qui en se servant des conditions (4.8) et (4.11) redonne bien (4.12).

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

- Déterminons maintenant l'expression de p_X . On sait que p_X vérifie l'edp (4.7) et la condition aux limites (4.11). Il reste à préciser la condition initiale.
- La position initiale X_0 d'une particule peut être choisie arbitrairement. Supposons donc que la position initiale soit choisie aléatoirement selon une loi uniforme sur Ω . Par définition, on a alors:

$$(4.13) \quad p_X(0, \mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} p_{X_0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\Omega|}, \text{ pour tout } \mathbf{x} \in \Omega$$

où $|\Omega|$ désigne la mesure de Lebesgue de Ω (son aire en dimension 2).

- Il est évident que la fonction constante définie par

$$p_X(t, \mathbf{x}) \stackrel{\text{def}}{=} p_{X_0}(\mathbf{x}), \text{ pour tout } t \geq 0 \text{ et pour tout } \mathbf{x} \in \Omega$$

vérifie (4.7)-(4.11)-(4.13).

- **Par unicité de la solution, on a donc prouvé que si à l'instant initial les particules sont équidistribuées sur Ω , elles le restent à tous les instants ultérieurs.**

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

- En revenant à (4.5), il en résulte que:

$$T(t, \mathbf{x}) = |\Omega| \int_{-\infty}^{+\infty} \theta p_Z(t, \mathbf{x}, \theta) d\theta$$

- Pour obtenir l'équation vérifiée par T , il suffit donc de multiplier par $|\Omega| \theta$ l'équation (4.3) vérifiée par p_Z et d'intégrer par rapport par θ . On obtient :

$$(4.14) \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(Tv_x)}{\partial x} + \frac{\partial(Tv_y)}{\partial y} - D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - D \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = -|\Omega| \int_{-\infty}^{+\infty} \theta \frac{\partial(p_Z f)}{\partial \theta} d\theta$$

- En intégrant par partie le dernier terme, on obtient (en omettant les variables t et \mathbf{x} pour alléger les notations):

$$\int_{-A}^A \theta \frac{\partial(p_Z f)}{\partial \theta} d\theta = - \int_{-A}^A p_Z f d\theta + f A p_Z(A) + f A p_Z(-A)$$

- Passons à la limite quand $A \rightarrow +\infty$ et montrons que les deux derniers termes tendent vers 0 moyennant une hypothèse supplémentaire.

4. Processus de dérive – diffusion associé à l'edp initiale

- Supposons qu'à $t=0$, la variable θ_0 prenne ses valeurs dans un intervalle borné $[a,b]$. Supposons de plus que f est continue sur $\mathbb{R}^+ \times \bar{\Omega}$ et, pour tout $\tau > 0$, posons $M_\tau = \max_{[0,\tau] \times \bar{\Omega}} |f|$. On déduit de (4.2) que :

$$(4.15) \quad \forall t \in [0, \tau], \quad \theta_t \in [a - \tau M_\tau, b + \tau M_\tau].$$

- Il en résulte que pour tout $t \in [0, \tau]$ et pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$, on a pour A suffisamment grand :

$$p_Z(t, \mathbf{x}, A) = p_Z(t, \mathbf{x}, -A) = 0$$

- On en déduit :

$$-|\Omega| \int_{-\infty}^{+\infty} \theta \frac{\partial(p_Z f)}{\partial \theta} d\theta = |\Omega| \int_{-\infty}^{+\infty} p_Z f d\theta = f |\Omega| \int_{-\infty}^{+\infty} p_Z d\theta = f |\Omega| p_X = f$$

- D'où finalement en se servant de (4.14) et (1.2), l'équation vérifiée par T :

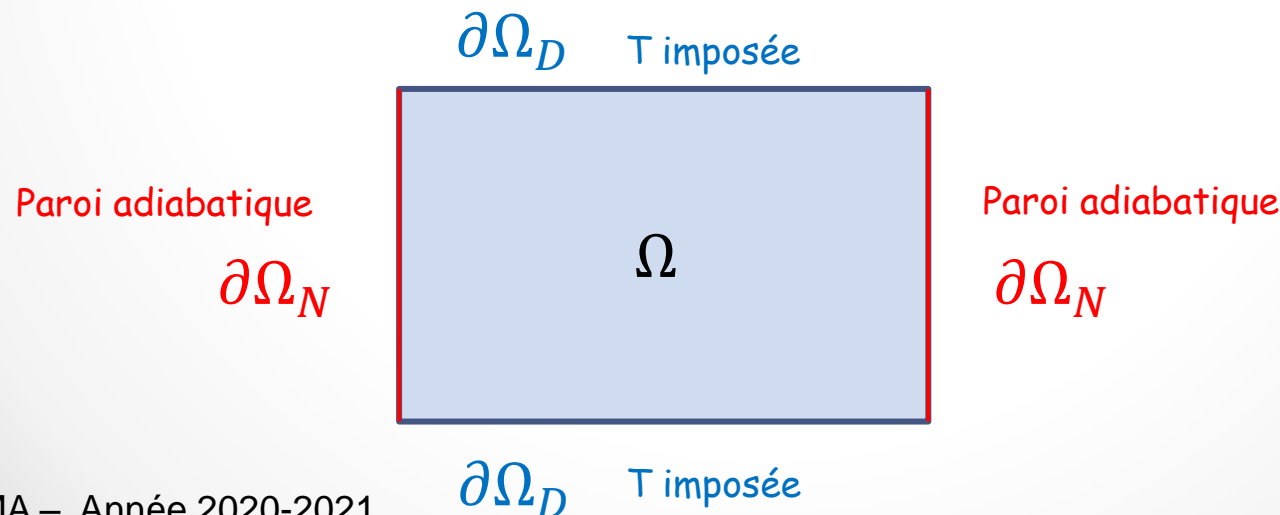
$$(4.16) \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T - D \Delta T = f$$

qui n'est autre que l'équation (1.1), c.q.f.d.

4. Prise en compte des condition initiale et aux limites

Pour que le problème initial soit bien posé, il faut spécifier la condition initiale et les conditions aux limites sur T .

- Condition initiale: (4.17) $T(0, \cdot) = T_0(\cdot)$
où T_0 est une fonction continue (donc bornée) sur $\bar{\Omega}$
- Conditions aux limites :
(4.18) $T(t, \mathbf{x}) = T_{imp}(t, \mathbf{x})$ pour tout $t \geq 0$ et pour tout $\mathbf{x} \in \partial\Omega_D$
(4.19) $\nabla T(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) = 0$ pour tout $t \geq 0$ et pour tout $\mathbf{x} \in \partial\Omega_N$
où T_{imp} est une fonction régulière sur $\partial\Omega_D$.



4. Prise en compte des condition initiale et aux limites

Enfin il reste à définir la loi de la variable aléatoire $\mathbf{Z}_0 = (\mathbf{X}_0, \theta_0)$ (position et température initiale des particules) et la manière dont l'équation (4.2) doit être modifiée pour tenir compte des CL sur T.

- En ce qui concerne \mathbf{Z}_0 , il faut pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$ satisfaire deux contraintes :

- (i) $\int_{-\infty}^{+\infty} p_{Z_0}(\mathbf{x}, \theta) d\theta = p_{X_0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\Omega|}$

- (ii) $|\Omega| \int_{-\infty}^{+\infty} \theta p_{Z_0}(\mathbf{x}, \theta) d\theta = T_0(\mathbf{x})$

- La solution la plus simple pour satisfaire à la fois (i) et (ii) consiste à prendre:

$$p_{Z_0}(\mathbf{x}, \theta) = \frac{\delta_{\theta - T_0(\mathbf{x})}}{|\Omega|}$$

- **Concrètement cela revient à tirer aléatoirement (selon une loi uniforme) la position initiale des particules et à leur affecter comme température initiale la valeur de T_0 au point où elles sont situées.**

4. Prise en compte des condition initiale et aux limites

- En ce qui concerne la prise en compte des CL, le principe consiste, comme pour la variable X_t , à modifier l'équation (4.2) lorsque la particule atteint la frontière.
- Il convient de distinguer deux cas :
 - **Si la particule atteint la frontière $\partial\Omega_N$, sa température ne doit pas être modifiée.** C'est intuitif puisque, physiquement, on a vu au chapitre 1 que la CL (4.18) modélise une paroi adiabatique donc sans échange de chaleur à son contact.
 - **Si la particule atteint la frontière $\partial\Omega_D$, sa température doit instantanément être remplacée par la valeur $T_{imp}(t, X_t)$.** Dans ce cas la frontière agit comme une source (ou un puit) de chaleur et impose sa température à la particule qui entre en contact avec elle.

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo et algorithme associé

On dispose maintenant de toutes les briques nécessaires pour résoudre numériquement à l'aide d'un algorithme de Monte-Carlo le problème:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T - D \Delta T = f \quad \text{sur } \mathbb{R}^+ \times \Omega$$

$$T(0, \mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x}) \quad \text{sur } \Omega$$

$$T(t, \mathbf{x}) = T_{imp}(t, \mathbf{x}) \quad \text{sur } \mathbb{R}^+ \times \partial\Omega_D$$

$$\nabla T(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \mathbb{R}^+ \times \partial\Omega_N$$

Les 3 étapes de l'algorithme sont les suivantes.

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo et algorithme associé

Etape 1: On répartit uniformément K particules (appelée particules numériques) dans le domaine Ω . On note $X_0^{(k)}$ la position initiale de la particule k et on lui affecte la température initiale $\theta_0^{(k)} = T_0(X_0^{(k)})$.

Etape 2: On choisit un pas de temps Δt et on fait évoluer la position et la température de chaque particule jusqu'à l'instant t souhaité selon le schéma :

- $X_{n+1}^{(k*)} = X_n^{(k)} + \mathbf{v}(t_n, X_n^{(k)})\Delta t + \sqrt{2D \Delta t}\boldsymbol{\theta}_n^{(k)}$
- $\theta_{n+1}^{(k*)} = \theta_n^{(k)} + f(t_n, X_n^{(k)})\Delta t$
- $X_{n+1}^{(k)} = \mathbf{R}(X_n^{(k)}, X_{n+1}^{(k*)})$
- $\theta_{n+1}^{(k)} = P(X_n^{(k)}, X_{n+1}^{(k*)}, \theta_{n+1}^{(k*)})$

où:

- les $\boldsymbol{\theta}_n^{(k)}$ sont des vecteurs aléatoires gaussiens i.d.d. centrés, de matrice de covariance la matrice identité de \mathbb{R}^2 .
- \mathbf{R} est l'opérateur de réflexion spéculaire défini précédemment (slide 26).
- P est l'opérateur associé à la prise en compte des CL sur la température selon le principe décrit précédemment (slide 34)

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo et algorithme associé

Etape 3: On se donne une échelle de longueur $\varepsilon > 0$. Pour tout instant t_n et tout point $\mathbf{x} \in \Omega$, on calcule une approximation de $T(t, \mathbf{x})$ à l'aide de la formule:

$$(4.20) \quad T(t_n, \mathbf{x}) \approx \frac{1}{K_C} \sum_{\mathbf{x}_n^{(k)} \in C} \theta_n^{(k)}$$

où

- C désigne le carré* (l'hypercube en dimension d) de centre \mathbf{x} et de côté ε ,
- K_C désigne le nombre de particules numériques situées à l'instant t_n dans le carré C .

(4.20) est une approximation de $\mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{x}_{t_n} \in C)$, qui par définition tend vers $\mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{x}_{t_n} = \mathbf{x}) = T(t_n, \mathbf{x})$, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$.

* On peut tout aussi bien prendre un disque (ou un hypersphère en dimension d)

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo et algorithme associé

En pratique, la valeur du paramètre ε doit être ajustée au mieux en fonction du nombre total de particules numériques K .

- En effet, d'après la loi des grands nombres, l'erreur d'approximation dans (4.20) se comporte comme $\frac{1}{\sqrt{K_C}}$. A K fixé, il faut donc choisir ε suffisamment grand pour que $\mathbb{E}(K_C) = \frac{\varepsilon^2 K}{|\Omega|}$ soit lui-même suffisamment grand.
- Cependant un compromis doit être trouvé pour que dans le même temps $\mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{X}_{t_n} \in \mathbf{C})$ soit une bonne approximation de $\mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{X}_{t_n} = \mathbf{x})$. On peut montrer facilement* que: $\mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{X}_{t_n} \in \mathbf{C}) = \frac{1}{|C|} \int_C T(t, x, y) dx dy$ ce qui entraîne:

$$|\mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{X}_{t_n} \in \mathbf{C}) - \mathbb{E}(\theta_{t_n} | \mathbf{X}_{t_n} = \mathbf{x})| = \left| T(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{|C|} \int_C T(t, x, y) dx dy \right| = O(\varepsilon^2).$$

- L'erreur totale de la méthode se comporte donc comme $O(\frac{1}{\varepsilon\sqrt{K}}) + O(\varepsilon^2)$. Elle est donc minimale pour $\varepsilon \sim K^{-\frac{1}{6}}$ et la méthode converge donc vis-à-vis du nombre total de particules numériques en $O(K^{-\frac{1}{3}})$.

* Le prouver à titre d'exercice