

Méthodes de Monte Carlo : autour de la marche aléatoire sur les sphères et réduction de variance

M. Deaconu — P. Étoré — A. Lejay — M. Martinez
INRIA Lorraine et Sophia-Antipolis / Institut Élie Cartan (Nancy)

Objectifs

- Simulation de transport/diffusion dans des milieux discontinus et/ou fortement hétérogènes, à géométrie complexe
- Suivre les particules, afin de pouvoir ajouter des effets (interactions chimiques, ...)
- Améliorer les performances et le temps de calcul des méthodes de Monte Carlo, grâce à des techniques de **réduction de variance**

Utilisation des **fonctions de Green** comme densité d'une variable aléatoire (v.a.)

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \Delta u(x) = 0 \text{ sur } D \\ u(x) = \phi(x) \text{ sur } \partial D \end{cases} \iff u(x) = \int_{\partial D} K(x, y) \phi(y) d\sigma_y$$

Comme $K(x, y) \geq 0$ et $\int_{\partial D} K(x, y) d\sigma_y = 1$,

$$u(x) = \mathbf{E}[\phi(Y)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(Y^i) \quad (\text{loi des grands nombres})$$

Y v.a. de densité $K(x, \cdot)$, Y^1, Y^2, \dots indépendantes de même loi que Y

Cette méthode s'applique à toutes les équations linéaires avec un principe du maximum

Mais

Comment calculer K en général ?

La sol. de $Lu = 0$ sur D est aussi sol. de

$$\begin{cases} Lu = 0 \text{ sur } D' \text{ sous-domaine arbitraire de } D \\ u(x) = u(x) \text{ sur } \partial D' \end{cases}$$

Sur D' , u est approchée par la sol. v de

$$\begin{cases} \hat{L}v = 0 \text{ sur } D' \\ v(x) = u(x) \text{ sur } \partial D' \end{cases}$$

si \hat{L} de noyau de Poisson $\hat{K}_{D'}$ sur D' « proche » du noyau de Poisson $K_{D'}$ de L sur D'

\implies On construit une suite de domaines D'_1, D'_2, \dots et une suite de v.a. Y_1, Y_2, \dots de densité $\hat{K}_{D'_1}, \hat{K}_{D'_2}, \dots$ telles que

$$u(Y_i) \approx \mathbf{E} [u(Y_{i+1})] \text{ et donc } u(x) \approx \mathbf{E} [\phi(Y_{n^*})]$$

si $n^* = \inf \{ n \geq 0 \mid Y_n \text{ proche de } \partial D \}$

Avantages

- La suite Y_1, Y_2, \dots est construite récursivement, et chaque Y_i ne dépend que de Y_{i-1}
 - Les domaines D'_i sont choisis arbitrairement, de la plus simple possible
- ⇒ La dynamique des particules ne dépend que **localement** du milieu
- Ne nécessite pas forcément de maillages
 - Permet de traiter les cas elliptiques et paraboliques
 - S'adapte donc très bien à des domaines compliqués, ...
 - Codes très courts

Inconvénients

- Vitesse de convergence / Temps de calcul
- Limitations à certaines EDP (principe du maximum)

Cas de la dimension 1

- Caractérisation des processus de diffusion X évoluant dans un milieu discontinu :

$$X_t = X_0 + \int_0^t \sqrt{a\rho}(X_s)dB_s + \int_0^t (\rho\nabla a + b)(X_s)ds + \sum_i \alpha_i L_t^{x_i}(X)$$

avec B mouvement brownien, $L^x(X)$ temps local en x est associé à l'opérateur $\frac{\rho}{2}\nabla(a\nabla\cdot) + b\nabla$.

Étude théorique du comportement des particules lorsqu'elles atteignent les discontinuités à l'aide du mouvement brownien biaisé.

- Mise en place de différents schémas de discrétisation et de simulation de ces processus
 - Schéma d'Euler
 - Simulation à l'aide du mouvement brownien biaisé
 - Simulation par marche aléatoire (2 schémas)

Cas de coefficients constants en dimension d

Marche aléatoire sur les rectangles : permet de calculer efficacement des temps et des positions de sortie d'un domaine polygonal pour le mouvement brownien (EDP avec le Laplacien) :

- plus flexible que la marche aléatoire sur les sphères
- pas de maillage
- permet de prendre en compte des termes de transport
- temps de calcul augmentant linéairement avec la dimension d

Applications

- résolution de certaines EDP paraboliques et elliptiques
- calcul de la première valeur propre du laplacien
- calcul du coefficient d'échange dans le modèle à double porosité
- ...

Cas de coefficients réguliers en dimension d

Simulation d'équations différentielles stochastiques (EDS) par des méthodes de tirage d'importance afin de résoudre certaines EDP paraboliques et elliptiques avec

$$L = \frac{1}{2} a_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} + b_i \frac{\partial}{\partial x_i} + c$$

avec a, b, c réguliers
(en cours de développement)

- Réduction de variance : réduction de l'erreur Monte Carlo (qui dépend du nombre de tirages) pour un même temps de calcul
- Simulation d'événements rares
- Simulation dans des domaines à géométrie complexe
- Simulation de processus de diffusion conditionnés à ne pas atteindre certaines zones, ...