



THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

**préparée dans le cadre d'une cotutelle entre
l'Université de Grenoble et l' Université Saint-
Joseph de Beyrouth**

Spécialité : **Mathématiques Appliquées**

Arrêté ministériel : le 6 janvier 2005 -7 août 2006

Présentée par

« Rana FAKHEREDDINE »

Thèse dirigée par « **Christian LÉCOT** »,
codirigée par « **Rami EL HADDAD** »

préparée au sein du **Laboratoire de Mathématiques – LAMA
UMR 5127 de l'Université de Savoie**

dans l'École Doctorale **MSTII (Mathématiques, Sciences et
Technologies de l'Information, Informatique)**

Méthodes de Monte Carlo stratifiées pour l'intégration et la simulation numériques

Thèse soutenue publiquement le « **26 septembre 2013** »,
devant le jury composé de :

Monsieur Philippe BRIAND

Professeur, Université de Savoie, Président

Monsieur Pierre L'ECUYER

Professeur, Université de Montréal, Rapporteur

Monsieur Sylvain MAIRE

Maître de conférences, Université du Sud Toulon-Var, Rapporteur

Monsieur Abbas ALHAKIM

Assistant Professor, American University of Beirut, Membre

Monsieur Nabil NASSIF

Professor, American University of Beirut, Membre

Monsieur Tony SAYAH

Professeur, Université Saint-Joseph, Membre

Monsieur Rami EL HADDAD

Maître de conférences, Université Saint-Joseph, Co-directeur de thèse

Monsieur Christian LÉCOT

Professeur, Université de Savoie, Directeur de thèse

Université Joseph Fourier / Université Pierre Mendès France /
Université Stendhal / Université de Savoie / Grenoble INP



Résumé

Les méthodes de Monte Carlo (MC) sont des méthodes de simulation probabilistes basées sur l'utilisation des nombres aléatoires pour résoudre avec des ordinateurs des problèmes des sciences appliquées et des techniques. Leur principe de base est simple et repose sur le théorème de limite central : un paramètre, écrit sous forme de l'espérance d'une variable aléatoire, peut être approché par des évaluations répétées et indépendantes de cette variable. L'erreur de la méthode est évaluée par la variance de l'estimateur. Une façon d'améliorer la convergence est de réduire l'ordre de variance des estimateurs.

Le présent travail analyse des méthodes de réduction de la variance et examine leur efficacité pour l'intégration numérique et la résolution d'équations différentielles et intégrales.

Nous présentons d'abord les méthodes MC stratifiées et les méthodes d'échantillonnage par hypercube latin (LHS : *Latin Hypercube Sampling*). Parmi les méthodes de stratification, nous privilégions la méthode simple (MCS) : l'hypercube unité $I^s := [0; 1]^s$ est divisé en N sous-cubes d'égale mesure, et un point aléatoire est choisi dans chacun des sous-cubes. Cette génération peut être vue comme une hasardisation du point milieu. Nous analysons la variance de ces méthodes pour le problème de la quadrature numérique. Nous étudions particulièrement le cas de l'estimation de la mesure d'un sous-ensemble de I^s . La variance de la méthode MCS peut être majorée par $\mathcal{O}(1/N^{1+1/s})$. Les résultats d'expériences numériques en dimensions 2, 3 et 4 montrent que les majorations obtenues sont précises.

Nous proposons ensuite une méthode hybride entre MCS et LHS, qui possède les propriétés de ces deux techniques, avec un point aléatoire dans chaque sous-cube et les projections des points sur chacun des axes de coordonnées également réparties de manière régulière : une projection dans chacun des N sous-intervalles qui divisent $I := [0; 1]$ uniformément. Cette technique est appelée Stratification *Sudoku* (SS) à cause des propriétés de ses points rappelant ainsi une grille de Sudoku. Dans le même cadre d'analyse que précédemment, nous montrons que la variance de la méthode SS est majorée par $\mathcal{O}(1/N^{1+1/s})$; des expériences numériques en dimensions 2, 3 et 4 valident les majorations démontrées.

Nous nous intéressons ensuite à deux problèmes d'équations aux dérivées partielles pour lesquels nous proposons une approche de la méthode de marche aléatoire utilisant les techniques de réduction de variance précédentes.

Nous proposons un algorithme de résolution de l'équation de diffusion, avec un coefficient de diffusion constant ou non-constant en espace. On utilise des particules échantillonnées suivant la distribution initiale, qui effectuent un déplacement gaussien à chaque pas de temps. On ordonne les particules suivant leur position à chaque étape et on rem-

place les nombres aléatoires qui permettent de calculer les déplacements par les points stratifiés utilisés précédemment. On évalue l'amélioration apportée par cette technique sur des exemples numériques.

Nous utilisons finalement une approche analogue pour la résolution numérique de l'équation de coagulation, qui modélise l'évolution de la taille de particules pouvant s'agglomérer. Les particules sont d'abord échantillonnées suivant la distribution initiale des tailles. On fixe un pas de temps et, à chaque étape et pour chaque particule, on choisit au hasard un partenaire de coalescence et un nombre aléatoire qui décide de cette coalescence. Si l'on classe les particules suivant leur taille à chaque pas de temps et si l'on remplace les nombres aléatoires par des points stratifiés, on observe une réduction de variance par rapport à l'algorithme MC usuel.

Finalement, nous faisons un bilan du travail effectué et nous proposons quelques perspectives pour des travaux futurs.

Mots-clés : Méthode de Monte Carlo, hasardisation, stratification, réduction de variance, marche aléatoire, quadrature numérique, simulation, équation de diffusion, équation de coagulation.

Abstract

Monte Carlo (MC) methods are probabilistic simulation methods using random numbers to solve on computers problems from applied sciences and techniques. Their principle is based on the use of the central limit theorem : One estimates a parameter, written as the expected value of a random variable, by repeated and independent evaluations of the variable. The error of the method is approximated through the variance of the estimator. One way to improve the convergence is to reduce the order of the variance of the estimators.

In the present work, we analyze variance reduction methods and we test their efficiency for numerical integration and for solving differential or integral equations.

First, we present stratified MC methods and *Latin Hypercube Sampling* (LHS) technique. Among stratification strategies, we focus on the simple approach (MCS) : the unit hypercube $I^s := [0; 1]^s$ is divided into N subcubes having the same measure, and one random point is chosen in each subcube. This technique can be seen as a randomization of the midpoint rule. We analyze the variance of the method for the problem of numerical quadrature. The case of the evaluation of the measure of a subset of I^s is particularly detailed. The variance of the MCS method may be bounded by $\mathcal{O}(1/N^{1+1/s})$. The results of numerical experiments in dimensions 2, 3 and 4 show that the upper bounds are tight.

Then we propose an hybrid method between MCS and LHS, that has properties of both approaches, with one random point in each subcube and such that the projections of the points on each coordinate axis are also evenly distributed : one projection in each of the N subintervals that uniformly divide the unit interval $I := [0; 1]$. We call this technique *Sudoku Sampling* (SS) due to the properties of the points recalling a Sudoku grid. Conducting the same analysis as before, we show that the variance of the SS method is bounded by $\mathcal{O}(1/N^{1+1/s})$; the order of the bound is validated through the results of numerical experiments in dimensions 2, 3 and 4.

Next, we focus on two problems of partial differential equations for which we propose an approach of the random walk method using the variance reduction techniques previously analyzed.

We propose an algorithm for solving the diffusion equation with a constant or spatially-varying diffusion coefficient. One uses particles that are sampled from the initial distribution; they are subject to a Gaussian move in each time step. The particles are renumbered according to their positions in every step and the random numbers which give the displacements are replaced by the stratified points used above. The improvement brought by this technique is evaluated in numerical experiments.

An analogous approach is finally used for numerically solving the coagulation equation; this equation models the evolution of the sizes of particles that may agglomerate. The

particles are first sampled from the initial size distribution. A time step is fixed and, in every step and for each particle, a coalescence partner is chosen and a random number decides if coalescence occurs. If the particles are ordered in every time step by increasing sizes and if the random numbers are replaced by stratified points, a variance reduction is observed, when compared to the results of usual MC algorithm.

Finally, we review the work done and we give some perspectives for future work.

Keywords : Monte Carlo method, randomization, stratification, variance reduction, random walk, numerical quadrature, simulation, diffusion equation, coagulation equation.

Table des matières

Resume	i
Abstract	ii
Table des matières	iv
Introduction	1
1 Méthodes de Monte Carlo et quasi-Monte Carlo pour l'intégration numérique	5
1.1 Introduction	5
1.2 Les méthodes de Monte Carlo	6
1.2.1 Intégration numérique multi-dimensionnelle	6
1.2.2 Intervalle de confiance	8
1.2.3 Méthode d'échantillonnage stratifié	12
1.3 Les méthodes quasi-Monte Carlo	15
1.3.1 Intégration numérique quasi-Monte Carlo	16
1.3.2 Points quasi-aléatoires	18
1.3.3 Réseaux (t, m, s) et suites (t, s)	20
1.3.4 Suites de Niederreiter	22
1.4 Hasardisation	26
1.4.1 Méthodes de décalage linéaire	26
1.4.2 Ensembles de points à faible discrédance brouillés	27
1.5 Essais numériques	29
1.5.1 Estimation de J_s	29
1.5.2 Estimation de I	32
1.6 Conclusion	33
2 Les méthodes de Monte Carlo stratifiées et LHS	35
2.1 Introduction	35
2.2 Méthode de Monte Carlo stratifiée	35
2.2.1 Stratification simple	36
2.2.2 Estimation de l'intégrale d'une indicatrice	39
2.2.3 Essais numériques	45
2.3 Méthodes LHS	49
2.3.1 Construction d'ensembles LHS en dimension $s \geq 2$	49

2.3.2	Variance de l'estimateur LHS	53
2.3.3	Essais numériques	58
2.4	Conclusion	58
3	Méthode de Monte Carlo stratifiée Sudoku pour l'intégration numérique	61
3.1	Introduction	61
3.2	Stratification Sudoku	61
3.3	Calcul de la variance de l'estimateur stratifié Sudoku	66
3.4	Essais numériques	75
3.5	Conclusion	83
4	Méthode de Monte Carlo stratifiée pour la diffusion	85
4.1	Introduction	85
4.2	Simulation de l'équation de diffusion	86
4.3	Algorithme de simulation Monte Carlo stratifié en milieu homogène	89
4.4	Diffusion dans un milieu hétérogène : correction du pas gaussien	97
4.5	Algorithme de simulation Monte Carlo stratifié en milieu hétérogène	99
4.6	Conclusion	104
5	Simulation de la coagulation par la méthode stratifiée Sudoku	107
5.1	Introduction	107
5.2	Algorithme MC stratifié Sudoku pour l'équation de coagulation discrète	108
5.2.1	Description du schéma	111
5.2.2	Essais numériques : cas de l'équation discrète	115
5.3	Algorithme MC stratifié Sudoku pour l'équation de coagulation continue	119
5.3.1	Description du schéma	120
5.3.2	Essais numériques : cas de l'équation continue	124
5.4	Conclusion	128
	Bibliographie	130

Introduction

Les méthodes de Monte Carlo (MC) ont connu leur essor lors de la Seconde Guerre Mondiale, notamment dans le cadre du projet américain *Manhattan* portant sur le développement de l'arme nucléaire. Leur principe consiste à modéliser le problème considéré sous forme de l'intégrale d'une fonction en utilisant les outils du calcul des probabilités puis de la simuler numériquement en l'approchant par la moyenne de la fonction en des points pseudo-aléatoires. Ces points sont engendrés par ordinateur et ont des propriétés semblables à celles des points aléatoires. Il est difficile de savoir exactement qui parmi les chercheurs von Neumann, Ulam, Fermi et Metropolis, leur a donné le nom de Monte Carlo qui fait référence aux jeux de hasard pratiqués dans la principauté de Monaco [89, 44].

L'accessibilité des ordinateurs et la facilité de leur utilisation dans la résolution de problèmes réalistes ont popularisé ces méthodes [9, 80]. Aujourd'hui, elles comptent sans doute parmi les outils les plus utilisés par les ingénieurs. Elles le sont en physique des particules où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur, et pour des problèmes de transport ou de diffusion [54]. En mathématiques financières, elles sont couramment mises en œuvre pour calculer des produits financiers élaborés [36].

À partir de l'estimateur de Monte Carlo du paramètre étudié, il est possible de construire un intervalle de confiance qui mesure la précision de la méthode. La taille de cet intervalle est de l'ordre de $N^{-1/2}$, pour N points de simulation, et elle est indépendante de la dimension de l'espace, ce qui les rend avantageuses pour des problèmes de dimension élevée [10, 26]. Cependant, ces méthodes ont plusieurs inconvénients. En particulier, elles ne permettent pas d'exploiter les éventuelles propriétés de régularité de la fonction à intégrer et leur taux de convergence est faible, puisque, pour réduire l'erreur d'un facteur de 100, il faut multiplier N par 10 000. De plus, les simulations MC donnent souvent des résultats très bruités.

Dans l'objectif de réduire la variance d'un estimateur MC, qui est de l'ordre de N^{-1} , différentes techniques ont été mises au point, parmi lesquelles nous citons : la méthode des variables antithétiques, des variables de contrôle, d'échantillonnage préférentiel, d'échantillonnage stratifié [33, 81, 76].

Une autre possibilité pour améliorer la convergence des méthodes MC est de remplacer les nombres pseudo-aléatoires, qui simulent des variables aléatoires indépendantes, par des nombres quasi-aléatoires obtenus à partir de suites réparties le plus uniformément possible dans le domaine d'intégration considéré. On parle alors de méthodes quasi-Monte Carlo [53, 95, 98, 15, 12]. L'ordre de convergence de ces méthodes pour le problème de l'intégration numérique est de $N^{-1+\epsilon}$. En se limitant à des fonctions régulières et à des ensembles de points particuliers, on peut même avoir un ordre en $N^{-\alpha+\epsilon}$ avec $\alpha > 0$

arbitrairement grand [56, 12]. Pour ces méthodes déterministes, nous disposons d'une borne d'erreur due à Koksma et Hlawka qui fait intervenir la variation de la fonction à intégrer et qu'il est en général difficile de calculer précisément. De plus cette borne est pessimiste car l'ordre de convergence obtenu numériquement est meilleur que l'ordre théorique. Pour y remédier, on peut employer des nombres quasi-aléatoires *hasardisés*, c'est-à-dire faisant intervenir un paramètre aléatoire, grâce auquel on peut calculer la variance du résultat.

L'objectif de ce travail de thèse est la mise au point, le développement et la validation par des tests numériques de méthodes de simulation stratifiées dont les points sont aléatoires et possèdent également des propriétés de répartition uniforme comparables à celles des points QMC dans le but de réduire la variance par rapport à une méthode MC classique.

Au premier chapitre, nous présentons les méthodes MC, QMC et des méthodes quasi-Monte Carlo hasardisées. Nous les comparons dans des calculs numériques d'intégrales.

Au chapitre 2, une méthode de Monte Carlo stratifiée simple (MCS) est introduite et analysée. Nous considérons la stratégie suivante [40] : le cube unité de dimension s , $I^s = [0, 1]^s$, est partitionné en N sous-cubes identiques et dans chacun d'entre eux nous engendrons une variable aléatoire distribuée uniformément. Cela revient à effectuer une hasardisation des points de quadrature de la méthode des points milieux. Cette méthode d'échantillonnage stratifié a été analysée dans [6] pour l'intégration des fonctions régulières. Nous nous intéressons ici à l'intégration de fonctions indicatrices de sous-ensembles de I^s à l'aide de l'ensemble stratifié ainsi construit, puisque certains problèmes de simulation peuvent être transformés en des évaluations de telles intégrales. Nous établissons une borne de la variance de l'estimateur dont nous prouvons l'optimalité à travers des expériences numériques. La majoration de variance obtenue est de l'ordre de $N^{-1-1/s}$, ce qui prouve que cette méthode est bien une technique de réduction de la variance, au moins pour N suffisamment grand. Dans le cas où la frontière du domaine considéré est représentée par une fonction $f : \bar{I}^{s-1} \rightarrow \bar{I}$, la borne d'erreur s'exprime en fonction de la variation de f . L'analyse de cette approximation par une méthode quasi-Monte Carlo a été faite dans [104, 65]. Nous analysons également la méthode d'échantillonnage par hypercube latin (LHS) présentée dans [88]. Nous majorons la variance de l'estimateur du volume d'un rectangle à côtés parallèles aux axes de coordonnées et nous comparons les différentes méthodes dans des expériences numériques.

Dans le chapitre 3, nous développons une version hybride de la méthode stratifiée simple et de la méthode LHS. Il s'agit de construire un ensemble stratifié de points de I^s qui possède certaines des propriétés de répartition uniforme des réseaux utilisés dans les méthodes QMC. L'ensemble des points ainsi construit rappelle une grille de Sudoku, c'est pourquoi nous parlons de méthode de Monte Carlo stratifiée Sudoku. Nous démontrons une borne de la variance de l'estimateur de l'intégrale d'une fonction indicatrice. Des expériences numériques illustrent l'avantage de cette nouvelle méthode puisque les vitesses de convergence sont meilleures que celles des méthodes MC, LHS et MCS.

Le chapitre 4 est consacré à la simulation de l'équation de diffusion dans des milieux homogène et hétérogène par des méthodes de marche aléatoire [7, 41, 35, 117, 34]. Pour l'équation de diffusion en milieu infini, à coefficient de diffusion constant D_0 , nous considérons un ensemble de particules qui, à chaque pas de temps Δt , effectuent des déplacements

aléatoires. Un ensemble stratifié Sudoku est utilisé pour sélectionner les particules qui vont se déplacer et déterminer les amplitudes de leurs déplacements. Dans le cas d'un coefficient de diffusion qui varie en fonction de l'espace, $D(x)$, il ne suffit pas de remplacer D_0 par $D(x)$ dans les expressions des déplacements [49]. Une correction des pas gaussiens effectués par les particules a été mise en œuvre par Farnell et Gibson dans [28] pour une simulation MC. Une version QMC a été mise au point dans [21]. Nous proposons ici une version stratifiée de cet algorithme corrigé. Dans les deux cas, une étape de renumérotation des particules est essentielle pour la convergence du schéma numérique et permet de bénéficier des propriétés de répartition de l'ensemble stratifié. L'efficacité des deux algorithmes est mise en évidence à travers des essais numériques dans lesquels nous les comparons à l'algorithme de marche aléatoire classique. Les résultats obtenus indiquent que le nouveau schéma converge plus rapidement qu'un algorithme de Monte Carlo.

Enfin, au chapitre 5, nous nous intéressons à la résolution numérique des équations de coagulation discrète et continue. Pour chaque équation, un algorithme stratifié est proposé. Il est inspiré des algorithmes MC proposés par Babovsky [4] et QMC de [74, 71] et consiste à approcher la solution de l'équation par une somme de mesures de Dirac, celles-ci représentent la distribution de masse qui est solution de l'équation. Une première étape consiste à calculer un ensemble de N points dont la distribution approche la loi de probabilité de la condition initiale et qui, dans la suite, vont évoluer selon la dynamique de l'équation de coagulation pour approcher la solution à tout instant. Un schéma d'Euler est utilisé pour discrétiser l'équation et à chaque pas de temps, le problème est formulé comme l'intégration d'une indicatrice d'un sous-ensemble de I^3 . Un ensemble de points stratifiés Sudoku est alors utilisé pour effectuer une quadrature et déterminer l'évolution des particules. Comme au chapitre 4, un tri des particules selon leur masse croissante est effectué à chaque pas de temps. La comparaison de la méthode stratifiée avec la méthode de marche aléatoire met en évidence l'efficacité de la première à travers des essais numériques.

Finalement, dans la conclusion, nous résumons les résultats obtenus et nous donnons des pistes de recherche pour des études futures.

Chapitre 1

Méthodes de Monte Carlo et quasi-Monte Carlo pour l'intégration numérique

1.1 Introduction

Ce chapitre présente les méthodes de Monte Carlo (MC) pour le calcul approché d'une intégrale et introduit des techniques de réduction de la variance. Il propose également une approche élémentaire des méthodes quasi-Monte Carlo (QMC) et il décrit une technique d'hasardisation.

Les méthodes MC comptent sans doute parmi les outils les plus utilisés par les ingénieurs d'aujourd'hui. Leur principe est simple : il consiste à échantillonner la quantité à estimer à l'aide de points (pseudo-)aléatoires. Dans le cas de l'intégration numérique sur $I^s := [0, 1]^s$, on approche

$$\mathcal{I} = \int_{I^s} f(x) dx$$

par la moyenne $\widehat{\mathcal{I}}$ des valeurs prises par la fonction f sur un ensemble de N variables aléatoires indépendantes X_i , $i = 1, \dots, N$, où chaque X_i est de loi uniforme sur $[0, 1]^s$: $X_i \rightsquigarrow \mathcal{U}[0, 1]^s$. C'est-à-dire

$$\widehat{\mathcal{I}} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i).$$

En calculant la variance de l'estimateur (sans biais) ou en utilisant le théorème de limite central, on montre que l'ordre de convergence de la méthode est $\mathcal{O}(N^{-1/2})$. Les méthodes MC sont aussi utilisées non seulement pour calculer des intégrales [44, 10, 33, 26, 81, 127] mais aussi pour simuler des phénomènes de la physique, de la mécanique (des fluides ou des solides), de la chimie, de la biologie [9, 54, 80] et estimer des produits financiers [36].

Ces méthodes présentent plusieurs inconvénients. En particulier elles ne permettent pas, sans modification, d'exploiter les éventuelles propriétés de régularité de la fonction. Un autre inconvénient est leur faible taux de convergence : pour réduire l'erreur d'un facteur de 100, il faudrait multiplier N par 10 000. Comme les estimateurs sont sans biais, les résultats sont donc très bruités.

Les versions déterministes des méthodes MC sont les méthodes QMC consistant à remplacer les variables aléatoires indépendantes par des éléments d'ensembles de points à faible discrédance. Ceux-ci sont construits de façon à couvrir le domaine d'intégration $\bar{I}^s$ le plus uniformément possible. Sous certaines hypothèses de régularité sur f , l'ordre de convergence des méthodes QMC est $\mathcal{O}(N^{-1+\epsilon(s)})$ [53, 95, 98, 125, 15, 45, 100, 76, 12].

Un inconvénient des méthodes QMC est que les majorations d'erreur déterministes sont souvent trop larges donc inexploitable, quand on les compare aux intervalles de confiance des méthodes MC. Dans la pratique, les méthodes QMC peuvent concurrencer les méthodes MC en dimension petite ($s \leq 3$) ou modérée ($4 \leq s \leq 10$). Mais en grande dimension ($s \geq 11$), l'approche QMC pure devient inefficace.

Pour améliorer les caractéristiques et les performances des méthodes QMC, les spécialistes (académiques, industriels ou financiers) ont essayé d'introduire des paramètres aléatoires dans les ensembles de points déterministes. Cette démarche, assez récente, permet de bénéficier de la précision des méthodes QMC et de disposer d'intervalles de confiance pour les estimateurs, comme pour les méthodes MC. Ces méthodes hybrides sont souvent appelées méthodes quasi-Monte Carlo *randomisées*, que nous préférons nommer hasardisées. Le caractère aléatoire des points de ces méthodes permet l'évaluation de la variance de l'estimateur en faisant un certain nombre de répétitions indépendantes. Parmi les synthèses récentes sur les méthodes quasi-Monte Carlo hasardisées sont les publications de P. L'Ecuyer et C. Lemieux [57, 76].

1.2 Les méthodes de Monte Carlo

Nous commençons par l'introduction des méthodes de Monte Carlo dans le cadre de l'intégration numérique.

1.2.1 Intégration numérique multi-dimensionnelle

Dans de nombreux problèmes scientifiques, il s'agit de calculer une intégrale

$$\mathcal{I}(f) = \int_{I^s} f(x) dx,$$

où s est une dimension. Il n'est pas toujours possible de l'obtenir exactement : on cherche alors à l'approcher.

Les formules de quadrature classiques permettent d'approcher l'intégrale d'une fonction par une somme pondérée de ses valeurs en différents points. Parmi ces méthodes, les plus élémentaires sont les formules des rectangles, des trapèzes, des points milieux, de Simpson.

Le détail de la formule des points milieux composée va permettre de mettre en évidence une caractéristique faisant intervenir la dimension s du problème. La version la plus simple utilise un entier m et un pas $h := 1/m$; alors

$$\mathcal{I}(f) \approx S(f),$$

où

$$S(f) := h^s \sum_{j_1=0}^{m-1} \dots \sum_{j_s=0}^{m-1} f\left((2j_1+1)\frac{h}{2}, \dots, (2j_s+1)\frac{h}{2}\right).$$

L'erreur est définie par :

$$E(f) := \mathcal{I}(f) - S(f).$$

Si f est de classe C^2 sur $\bar{I}^s$, l'erreur est de l'ordre

$$\mathcal{O}\left(\frac{1}{m^2}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{2/s}}\right),$$

où $N = m^s$ est le nombre d'évaluations de la fonction f dans la formule. Pour diviser le majorant de l'erreur par deux, il faut multiplier le nombre de points d'intégration par $2^{s/2}$. Ce facteur croît exponentiellement avec la dimension s ; cela rend cette approche inutilisable en dimension élevée. Pour résoudre cette difficulté, on a développé les méthodes de Monte Carlo dont la vitesse de convergence est indépendante de la dimension du problème considéré [44, 10, 33, 26, 81]. L'idée principale de la méthode de Monte Carlo est d'exprimer une intégrale comme l'espérance d'une variable aléatoire.

Soit π une loi de probabilité sur $(\mathbb{R}^s, \mathcal{B}(\mathbb{R}^s))$. Soit f une fonction mesurable sur cet espace, telle que

$$\int_{\mathbb{R}^s} |f(x)| d\pi(x) < +\infty.$$

On note

$$\mathcal{I}_\pi(f) := \int_{\mathbb{R}^s} f(x) d\pi(x).$$

Soit $(X_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires s -dimensionnelles sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{T}, \mathbf{P})$, équidistribuées de loi π . Alors chaque $f \circ X_n$ est une variable aléatoire réelle intégrable et l'on a

$$\mathbf{E}[f \circ X_n] = \int_{\Omega} f \circ X_n(\omega) d\mathbf{P}(\omega) = \int_{\mathbb{R}^s} f(x) d\pi(x) = \mathcal{I}_\pi(f).$$

Si $(Y_n)_{n \geq 1}$ est une suite de variables aléatoires réelles équidistribuées, intégrables, de moyenne μ , on appelle *moyenne empirique* de N termes et on note $\bar{Y}_N$ la variable aléatoire réelle :

$$\bar{Y}_N := \frac{1}{N}(Y_1 + Y_2 + \dots + Y_N).$$

Alors

$$\mathbf{E}[\bar{Y}_N] = \frac{1}{N}(\mathbf{E}[Y_1] + \mathbf{E}[Y_2] + \dots + \mathbf{E}[Y_N]) = \mathbf{E}[Y_1] = \mu.$$

Ce qui prouve que $\bar{Y}_N$ est un estimateur sans biais de μ .

Dans le cas de l'intégration MC,

$$\overline{f \circ X}_N = \frac{1}{N}(f \circ X_1 + f \circ X_2 + \dots + f \circ X_N)$$

est un estimateur sans biais de $\mathcal{I}_\pi(f)$.

La convergence de la méthode de Monte Carlo est assurée par la *loi forte des grands nombres*.

Théorème 1.1 (Loi forte des grands nombre) Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite indépendante de variables aléatoires réelles équidistribuées. La suite $(\bar{Y}_N)_{N \geq 1}$ converge presque sûrement si et seulement si les variables Y_n sont intégrables. La limite est alors la valeur commune μ des espérances des Y_n et la suite $(\bar{Y}_N)_{N \geq 1}$ converge vers μ dans L^1 .

Revenant à notre problème d'estimation, $(f \circ X_n)_{n \geq 1}$ est une suite indépendante de variables aléatoires réelles équidistribuées intégrables, d'espérance $\mathcal{I}_\pi(f)$. D'après la loi forte des grands nombres, on a

$$\overline{f \circ X_N} \xrightarrow{p.s.} \mathcal{I}_\pi(f).$$

1.2.2 Intervalle de confiance

Sous des hypothèses plus fortes, la méthode de Monte Carlo fournit aussi un intervalle qui contient l'approximation de l'intégrale avec une probabilité (de limite) donnée. C'est la définition de ce qu'on appelle l'*intervalle de confiance*. On fait donc l'hypothèse supplémentaire :

$$\int_{\mathbb{R}^s} |f(x)|^2 d\pi(x) < +\infty$$

et l'on note

$$\sigma_\pi^2(f) := \int_{\mathbb{R}^s} |f(x)|^2 d\pi(x) - \left(\int_{\mathbb{R}^s} f(x) d\pi(x) \right)^2. \quad (1.2.1)$$

Chaque variable aléatoire réelle $f \circ X_n$ est alors de carré intégrable et

$$\mathbf{E}[(f \circ X_n)^2] = \int_{\Omega} (f \circ X_n(\omega))^2 dP(\omega) = \int_{\mathbb{R}^s} |f(x)|^2 d\pi(x),$$

donc

$$\mathbf{Var}(f \circ X_n) = \sigma_\pi^2(f).$$

Si $(Y_n)_{n \geq 1}$ est une suite indépendante de variables aléatoires réelles équidistribuées de carré intégrable, de moyenne μ et de variance σ^2 , on a :

$$\mathbf{Var}(\bar{Y}_N) = \frac{1}{N^2} \left(\sum_{n=1}^N \mathbf{Var}(Y_n) \right) = \frac{\sigma^2}{N}.$$

On appelle *variance empirique* (de N termes) et on note $\bar{S}_N^2$ la variable aléatoire réelle

$$\bar{S}_N^2 := \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (Y_n - \bar{Y}_N)^2 = \frac{1}{N-1} \left(\sum_{n=1}^N Y_n^2 - N\bar{Y}_N^2 \right).$$

On a

$$\mathbf{E}[\bar{S}_N^2] = \frac{N}{N-1} (\mathbf{E}[Y_1^2] - \mathbf{E}[\bar{Y}_N^2]) = \frac{N}{N-1} (\sigma^2 + \mu^2 - \mathbf{E}[\bar{Y}_N^2]),$$

et comme

$$\mathbf{E}[\bar{Y}_N^2] = \mathbf{Var}(\bar{Y}_N) + \mathbf{E}[\bar{Y}_N]^2 = \frac{\sigma^2}{N} + \mu^2,$$

on a

$$\mathbf{E}[\bar{S}_N^2] = \frac{N}{N-1} \left(\sigma^2 + \mu^2 - \frac{\sigma^2}{N} - \mu^2 \right) = \sigma^2.$$

Donc $\bar{S}_N^2$ est un estimateur sans biais de σ^2 .
Dans le problème de l'intégration numérique

$$\bar{S}_{\pi,N}^2(f) := \frac{1}{N-1} \left(\sum_{n=1}^N (f \circ X_n)^2 - N(\overline{f \circ X_n})^2 \right)$$

est un estimateur sans biais de $\sigma_\pi^2(f)$.

L'intérêt de l'intervalle de confiance est basé sur le *théorème de limite central* qui permet de contrôler la précision de la méthode de Monte Carlo.

Théorème 1.2 (Théorème de limite central) Si $(Y_n)_{n \geq 1}$ est une suite indépendante de variables aléatoires réelles équidistribuées dans L^2 , on a

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{n=1}^N Y_n - \mathbf{E} \left[\sum_{n=1}^N Y_n \right] \right) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2),$$

où σ^2 est la variance commune des Y_n .

Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite indépendante de variables aléatoires équidistribuées dans L^2 . On note μ et σ^2 l'espérance et la variance commune des Y_n et on pose :

$$\bar{Z}_N := \frac{\bar{Y}_N - \mu}{\sigma/\sqrt{N}}.$$

On remarque que

$$\mathbf{E}[\bar{Z}_N] = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{Var}(\bar{Z}_N) = 1.$$

En utilisant le fait que

$$\sqrt{N}(\bar{Y}_N - \mu) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2),$$

on obtient :

$$\bar{Z}_N \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1).$$

Donc, pour $a > 0$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq a) = 2\Phi(a) - 1,$$

où

$$\Phi(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy, \quad x \in \mathbb{R}$$

est la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$. On a donc

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left(|\bar{Y}_N - \mu| \leq \frac{\sigma a}{\sqrt{N}} \right) = 2\Phi(a) - 1.$$

TABLE 1.1 – Niveau de confiance.

a	1	1.96	2	2.5758	3
$2\Phi(a)-1$	0.6826	0.9500	0.9544	0.9900	0.9974

On reprend notre problème d'intégration : π est une probabilité sur $(\mathbb{R}^s, \mathcal{B}(\mathbb{R}^s))$ et f est une fonction mesurable sur $(\mathbb{R}^s, \mathcal{B}(\mathbb{R}^s))$, telle que

$$\int_{\mathbb{R}^s} (f(x))^2 d\pi(x) < +\infty.$$

La suite $(X_n)_{n \geq 1}$ est une suite indépendante de variables aléatoires s -dimensionnelles équiréparties de loi π , donc la famille $(f \circ X_n)_{n \geq 1}$ est une suite indépendante de variables aléatoires réelles équiréparties, d'espérance $\mathcal{I}_\pi(f)$ et de variance $\sigma_\pi^2(f)$. Le théorème de limite central implique, que pour tout $a > 0$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}\left(\left|\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n - \mathcal{I}_\pi(f)\right| \leq \frac{\sigma_\pi(f)a}{\sqrt{N}}\right) = 2\Phi(a) - 1.$$

L'intervalle *aléatoire*

$$\left[\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n - \frac{\sigma_\pi(f)a}{\sqrt{N}}, \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n + \frac{\sigma_\pi(f)a}{\sqrt{N}}\right]$$

s'appelle l'*intervalle de confiance de niveau de confiance*

$$\beta := 2\Phi(a) - 1.$$

La Table 1.1 donne les valeurs du niveau de confiance en fonction de a .

On a la conséquence suivante du théorème de limite central, utile en pratique.

Proposition 1.1 *Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite indépendante de variables aléatoires réelles équiréparties et dans L^2 , d'espérance μ et de variance σ^2 . Si*

$$\bar{Y}_N := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Y_n \quad \text{et} \quad \bar{S}_N^2 := \frac{1}{N-1} \left(\sum_{n=1}^N Y_n^2 - N\bar{Y}_N^2 \right),$$

on a, pour tout $a > 0$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}\left(\left|\bar{Y}_N - \mu\right| \leq \frac{\bar{S}_N a}{\sqrt{N}}\right) = 2\Phi(a) - 1,$$

où $\bar{S}_N := \sqrt{\bar{S}_N^2}$.

Preuve. La loi forte des grands nombres (théorème 1.1) implique :

$$\bar{S}_N \xrightarrow{p.s.} \sigma.$$

D'après le théorème de limite central (théorème 1.2), pour tout $a > 0$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma a) = 2\Phi(a) - 1,$$

où

$$\bar{Z}_N := \sqrt{N}(\bar{Y}_N - \mu).$$

Soit $0 < \alpha < a$. On a

$$\begin{aligned} \{|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a\} \\ &= \{|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a + \alpha), |\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a\} + \{|\bar{Z}_N| > \sigma(a + \alpha), |\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a\} \\ &\subset \{|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a + \alpha)\} + \{\sigma(a + \alpha) < \bar{S}_N a\} \end{aligned}$$

donc

$$\mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a) \leq \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a + \alpha)) + \mathbf{P}\left(\frac{\sigma\alpha}{a} < \bar{S}_N - \sigma\right).$$

De même

$$\begin{aligned} \{|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a - \alpha)\} \\ &= \{|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a - \alpha), |\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a\} + \{|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a - \alpha), |\bar{Z}_N| > \bar{S}_N a\} \\ &\subset \{|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a\} + \{\bar{S}_N a < \sigma(a - \alpha)\} \end{aligned}$$

donc

$$\mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a - \alpha)) \leq \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a) + \mathbf{P}\left(\frac{\sigma\alpha}{a} < \sigma - \bar{S}_N\right).$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a - \alpha)) - \mathbf{P}\left(\frac{\sigma\alpha}{a} < \sigma - \bar{S}_N\right) \\ &\leq \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a) \\ &\leq \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a + \alpha)) + \mathbf{P}\left(\frac{\sigma\alpha}{a} < \bar{S}_N - \sigma\right). \end{aligned}$$

Soit $\varepsilon > 0$. Comme

$$\lim_{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ \alpha > 0}} \Phi(a - \alpha) = \Phi(a) = \lim_{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ \alpha > 0}} \Phi(a + \alpha),$$

il existe $0 < \alpha < a$ tel que

$$\Phi(a) - \varepsilon < \Phi(a - \alpha) < \Phi(a) < \Phi(a + \alpha) < \Phi(a) + \varepsilon.$$

Il existe $N_1 \in \mathbb{N}$ tel que si $N \geq N_1$,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a - \alpha)) &\geq 2\Phi(a - \alpha) - 1 - \varepsilon \geq 2\Phi(a) - 1 - 3\varepsilon, \\ \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \sigma(a + \alpha)) &\leq 2\Phi(a + \alpha) - 1 + \varepsilon \leq 2\Phi(a) - 1 + 3\varepsilon. \end{aligned}$$

Comme

$$\bar{S}_N \xrightarrow{p.s.} \sigma$$

on a

$$\bar{S}_N \xrightarrow{\mathbf{P}} \sigma$$

donc il existe $N_2 \in \mathbb{N}$ tel que si $N \geq N_2$,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left(\sigma - \bar{S}_N > \frac{\sigma\alpha}{a}\right) &\leq \mathbf{P}\left(\left|\sigma - \bar{S}_N\right| > \frac{\sigma\alpha}{a}\right) < \varepsilon, \\ \mathbf{P}\left(\bar{S}_N - \sigma > \frac{\sigma\alpha}{a}\right) &\leq \mathbf{P}\left(\left|\bar{S}_N - \sigma\right| > \frac{\sigma\alpha}{a}\right) < \varepsilon. \end{aligned}$$

Finalement pour tout $N \geq \max(N_1, N_2)$

$$2\Phi(a) - 1 - 4\varepsilon \leq \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a) \leq 2\Phi(a) - 1 + 4\varepsilon$$

donc

$$|\mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a) - 2\Phi(a) + 1| \leq 4\varepsilon.$$

Par conséquent

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}(|\bar{Z}_N| \leq \bar{S}_N a) = 2\Phi(a) - 1,$$

qui est le résultat. $\square$

Dans le problème d'intégration, sous les mêmes conditions sur la suite $(X_n)_{n \geq 1}$, on a pour tout $a > 0$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}\left(\left|\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n - \mathcal{I}_\pi(f)\right| \leq \frac{\bar{S}_{\pi,N}(f)a}{\sqrt{N}}\right) = 2\Phi(a) - 1,$$

où $\bar{S}_{\pi,N}(f) := \sqrt{\bar{S}_{\pi,N}(f)^2}$. L'intervalle aléatoire

$$\left[\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n - \frac{\bar{S}_{\pi,N}(f)a}{\sqrt{N}}, \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n + \frac{\bar{S}_{\pi,N}(f)a}{\sqrt{N}}\right]$$

est l'intervalle de confiance *pratique* de niveau de confiance $\beta = 2\Phi(a) - 1$. En effet la variance $\sigma_\pi^2(f)$ est tout autant inconnue que $\mathcal{I}_\pi(f)$.

La variance contrôle l'erreur de la méthode MC. L'usage d'échantillons *stratifiés* de points aléatoires peut réduire cette variance [33, 26, 81, 36, 76]. Nous présentons dans la suite cette technique d'échantillonnage.

1.2.3 Méthode d'échantillonnage stratifié

Soit $N > 0$ un entier et soient $X_1, \dots, X_N$ des variables aléatoires indépendantes de loi π . On note

$$S := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f \circ X_n.$$

On a

$$E[S] = \mathcal{I}_\pi(f) \quad \text{et} \quad \mathbf{Var}(S) = \frac{\sigma_\pi^2(f)}{N}.$$

Alors S est l'estimateur de Monte Carlo de $\mathcal{I}_\pi(f)$.

Soit

$$\{D_i : 1 \leq i \leq p\}$$

une partition de $\mathbb{R}^s$ formée d'ensembles boréliens :

$$\mathbb{R}^s = \bigcup_{i=1}^p D_i \quad \text{et} \quad i \neq j \Rightarrow D_i \cap D_j = \emptyset.$$

On note

$$a_i := \int_{D_i} d\pi(x) \quad \text{et} \quad \mathcal{I}_i(f) := \int_{D_i} f(x) d\pi(x).$$

Alors

$$\sum_{i=1}^p a_i = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^p \mathcal{I}_i(f) = \mathcal{I}_\pi(f).$$

Si

$$\pi_i := \frac{1_{D_i}}{a_i} \pi,$$

alors π_i est une probabilité sur $\mathbb{R}^s$.

Soient $n_1, \dots, n_p$ des entiers strictement positifs et pour chaque $i : 1 \leq i \leq p$ soient $X_1^{(i)}, \dots, X_{n_i}^{(i)}$ des variables aléatoires de loi π_i . On suppose que la famille de variables aléatoires

$$\{X_k^{(i)} : 1 \leq i \leq p, 1 \leq k \leq n_i\}$$

est indépendante. Soit

$$T_i := \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} f \circ X_k^{(i)}, \quad 1 \leq i \leq p \quad \text{et} \quad T := \sum_{i=1}^p a_i T_i.$$

Comme

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[T_i] &= \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} \mathbf{E}[f \circ X_k^{(i)}] = \mathbf{E}[f \circ X_1^{(i)}] = \int_{\Omega} f \circ X_1^{(i)}(\omega) d\mathbf{P}(\omega) = \int_{\mathbb{R}^s} f(x) d\pi_i(x) \\ &= \frac{1}{a_i} \int_{D_i} f(x) d\pi(x) = \frac{\mathcal{I}_i(f)}{a_i}, \end{aligned}$$

on a

$$\mathbf{E}[T] = \sum_{i=1}^p a_i \frac{\mathcal{I}_i(f)}{a_i} = \mathcal{I}_\pi(f),$$

donc T est un estimateur sans biais de $\mathcal{I}_\pi(f)$: on l'appelle l'estimateur stratifié de $\mathcal{I}_\pi(f)$.

On note

$$\sigma_i^2(f) := \int_{\mathbb{R}^s} (f(x))^2 d\pi_i(x) - \left(\int_{\mathbb{R}^s} f(x) d\pi_i(x) \right)^2.$$

Comme

$$\begin{aligned}\mathbf{Var}(T_i) &= \frac{1}{n_i^2} \sum_{k=1}^{n_i} \mathbf{Var}(f \circ X_k^{(i)}) = \frac{1}{n_i} \mathbf{Var}(f \circ X_1^{(i)}) \\ &= \frac{1}{n_i} \left(\int_{\Omega} (f \circ X_1^{(i)})^2(\omega) d\mathbf{P}(\omega) - \left(\int_{\Omega} f \circ X_1^{(i)}(\omega) d\mathbf{P}(\omega) \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{n_i} \left(\int_{\mathbb{R}^s} (f(x))^2 d\pi_i(x) - \left(\int_{\mathbb{R}^s} f(x) d\pi_i(x) \right)^2 \right) = \frac{\sigma_i^2(f)}{n_i},\end{aligned}$$

on a

$$\mathbf{Var}(T) = \sum_{i=1}^p a_i^2 \mathbf{Var}(T_i) = \sum_{i=1}^p \frac{(a_i \sigma_i(f))^2}{n_i}.$$

On suppose dans la suite

$$\sum_{i=1}^p n_i = N. \quad (1.2.2)$$

Pour la méthode d'allocation proportionnelle, on choisit

$$n_i = N a_i, \quad 1 \leq i \leq p.$$

Alors

$$\begin{aligned}\mathbf{Var}(T) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p a_i \sigma_i^2(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p a_i \int_{\mathbb{R}^s} (f(x))^2 d\pi_i(x) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p \frac{\mathcal{I}_i(f)^2}{a_i} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p \int_{D_i} (f(x))^2 d\pi(x) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p \frac{\mathcal{I}_i(f)^2}{a_i} \\ &= \frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^s} (f(x))^2 d\pi(x) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p \frac{\mathcal{I}_i(f)^2}{a_i} = \mathbf{Var}(S) + \frac{\mathcal{I}_{\pi}(f)^2}{N} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p \frac{\mathcal{I}_i(f)^2}{a_i}\end{aligned}$$

donc

$$\mathbf{Var}(S) = \mathbf{Var}(T) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p a_i \left(\frac{\mathcal{I}_i(f)}{a_i} - \mathcal{I}_{\pi}(f) \right)^2 \geq \mathbf{Var}(T).$$

La méthode de Monte Carlo d'échantillonnage stratifié avec allocation proportionnelle ne peut pas être plus mauvaise que la méthode de Monte Carlo simple, car la variance de l'estimateur de la première ne peut pas dépasser celle de la seconde.

On note

$$\delta := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^p a_i \sigma_i(f)$$

et

$$V(n_1, \dots, n_p) := \sum_{i=1}^p \frac{(a_i \sigma_i(f))^2}{n_i}.$$

Si $(n_1, \dots, n_p) \in \mathbb{N}^{*p}$ vérifie (1.2.2),

$$\begin{aligned} V\left(\frac{a_1\sigma_1(f)}{\delta}, \dots, \frac{a_p\sigma_p(f)}{\delta}\right) &= \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^p a_i \sigma_i(f) \right)^2 \\ &\leq \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^p \frac{(a_i \sigma_i(f))^2}{n_i} \right) \sum_{i=1}^p n_i = V(n_1, \dots, n_p), \end{aligned}$$

en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz. Le choix optimal de $(n_1, \dots, n_p)$ vérifiant (1.2.2), pour le calcul de $\mathcal{I}_\pi(f)$ par la méthode de Monte Carlo d'échantillonnage stratifié est donc

$$n_1 = \frac{a_1\sigma_1(f)}{\delta}, \dots, n_p = \frac{a_p\sigma_p(f)}{\delta}.$$

On peut conclure ce paragraphe d'introduction aux méthodes de Monte Carlo en se basant sur le théorème de limite central que la vitesse de convergence d'une méthode MC est d'ordre $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$. Elle est indépendante de la dimension du problème. Cet atout des méthodes MC est contrebalancé par quelques inconvénients :

- la borne d'erreur est probabiliste,
- la convergence est lente quand $N \rightarrow \infty$,
- la régularité de la fonction à intégrer n'apparaît pas dans l'estimation,
- la génération d'une suite de variables aléatoires est problématique.

Une voie pour éviter ces inconvénients en conservant des avantages des méthodes MC est de remplacer les suites de points aléatoires par des suites déterministes ayant une meilleure répartition uniforme; ces suites sont appelées *suites à discrétion faible*. C'est le principe des méthodes *quasi-Monte Carlo*.

1.3 Les méthodes quasi-Monte Carlo

On va de nouveau étudier l'approximation

$$\int_{I^s} f(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n),$$

où f est une fonction définie sur I^s , à valeurs dans $\mathbb{R}$ et $(x_n)_{1 \leq n \leq N}$ est une famille de points de I^s . On cherche à obtenir une majoration d'erreur meilleure que $\mathcal{O}(N^{-1/2})$. Les ouvrages [53, 95, 98, 125, 15, 45, 100, 76, 12] sont les références classiques sur les méthodes quasi-Monte Carlo.

1.3.1 Intégration numérique quasi-Monte Carlo

On examine d'abord l'intégration de fonctions indicatrices de boréliens. L'erreur d'intégration des fonctions indicatrices des rectangles permettra de majorer l'erreur d'intégration d'une classe de fonctions assez générale.

Si $X := \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ est un ensemble de N points de I^s et B est un borélien inclus dans I^s , on définit

$$A(B, X) := \#\{n : x_n \in B\},$$

où $\#E$ note le cardinal de l'ensemble E .

Définition 1.1 Si X est un ensemble de N points de I^s et si $B \subset I^s$ est mesurable, la discrédance locale de X pour B est définie par

$$D_N(B, X) := \frac{A(B, X)}{N} - \lambda_s(B).$$

La discrédance de l'ensemble X est définie par

$$D_N(X) := \sup_J |D_N(J, X)|,$$

où J parcourt l'ensemble des sous-intervalles semi-ouverts de I^s :

$$J = \prod_{i=1}^s [u_i, v_i).$$

La discrédance à l'origine de X est donnée par

$$D_N^*(X) := \sup_{J^*} |D_N(J^*, X)|,$$

où J^* parcourt l'ensemble des sous-intervalles semi-ouverts de I^s de la forme

$$J^* = \prod_{i=1}^s [0, w_i).$$

Si $X := (x_n)_{n \geq 1}$ est une suite infinie de points de I^s , on note $D_N(X)$ la discrédance de l'ensemble $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ des N premiers termes de la suite, et on note $D_N^*(X)$ la discrédance à l'origine de cet ensemble.

Discrédance et discrédance à l'origine sont des erreurs d'intégration des fonctions indicatrices des intervalles. Elles sont liées dans le résultat suivant.

Proposition 1.2 Les discrédances $D_N(X)$ et $D_N^*(X)$ vérifient

$$D_N^*(X) \leq D_N(X) \leq 2^s D_N^*(X).$$

En dimension $s = 1$, on a des formules explicites de calcul des discrédances.

Proposition 1.3 Si $X := \{x_1, x_2, \dots, x_N\} \subset I$ avec

$$0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N < 1$$

on a

$$D_N^*(X) = \frac{1}{2N} + \max_{1 \leq n \leq N} \left| x_n - \frac{2n-1}{2N} \right|,$$

$$D_N(X) = \frac{1}{N} + \max_{1 \leq n \leq N} \left(\frac{n}{N} - x_n \right) - \min_{1 \leq n \leq N} \left(\frac{n}{N} - x_n \right).$$

On peut conclure du résultat précédent que l'ensemble

$$\left\{ \frac{2n-1}{2N} : 1 \leq n \leq N \right\}$$

est celui qui a la plus petite discrédance à l'origine possible.

Notre but est de majorer l'erreur d'intégration :

$$\int_I f(x) dx - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n)$$

pour une classe de fonctions assez générale. On supposera que f est à variation bornée sur $\bar{I}$. On note la variation de f

$$V(f) := \sup_{\Xi} \sum_{j=1}^p |f(\xi_j) - f(\xi_{j-1})|$$

où $\Xi = \{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_p\}$ parcourt l'ensemble des familles de points tels que

$$0 = \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_p = 1.$$

Toute fonction à variation bornée sur $\bar{I}$ est intégrable au sens de Riemann sur $\bar{I}$.

Le résultat suivant est dû à J.F. Koksma (1942).

Proposition 1.4 Si f a une variation bornée $V(f)$ sur $\bar{I}$ et si $X := \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ est un ensemble de points de I on a

$$\left| \int_I f(x) dx - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) \right| \leq V(f) D_N^*(X).$$

Pour étendre l'inégalité de Koksma au cas multi-dimensionnel, il faut disposer d'une notion de variation des fonctions de plusieurs variables [47].

Pour une fonction $f : \bar{I}^s \rightarrow \mathbb{R}$ et pour $w, w' \in \bar{I}^s$ et $1 \leq i \leq s$, on note

$$T_w^i f \text{ la restriction de } f \text{ à l'hyperplan } x_i = w_i,$$

$$\Delta_{w,w'}^i f := T_{w'}^i f - T_w^i f.$$

Si $K = \{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, s\}$, on note

$$T_w^K f := T_w^{i_1} \dots T_w^{i_k} f \quad \text{et} \quad \Delta_{w,w'}^K f := \Delta_{w,w'}^{i_1} \dots \Delta_{w,w'}^{i_k} f.$$

On pose

$$T_w f := T_w^{\{1, \dots, s\}} f \quad \text{et} \quad \Delta_{w,w'} f := \Delta_{w,w'}^{\{1, \dots, s\}} f.$$

Si

$$0 = x_{0,i} < x_{1,i} < \dots < x_{n_i,i} = 1, \quad \text{pour} \quad 1 \leq i \leq s$$

définit une partition de $\bar{I}^s$ en sous-intervalles, et si $a = (a_1, \dots, a_s)$ est un indice multi-dimensionnel (avec des entiers a_i , $0 \leq a_i < n_i$), on note

$$x_a := (x_{a_1,1}, \dots, x_{a_s,s}) \quad \text{et} \quad a+ = (a_1 + 1, \dots, a_s + 1).$$

Enfin $\mathbf{1} \in \bar{I}^s$ est défini par $\mathbf{1} := (1, \dots, 1)$.

Définition 1.2 Soit f une fonction de $\bar{I}^s$ dans $\mathbb{R}$. La variation au sens de Vitali de f est

$$V^{(s)}(f) := \sup_{\mathcal{P}} \sum_{\mathbf{a}} |\Delta_{\mathbf{x}_{\mathbf{a}}, \mathbf{x}_{\mathbf{a}+}} f|,$$

où $\mathcal{P}$ parcourt l'ensemble de toutes les partitions de $\bar{I}^s$ en sous-intervalles.

La variation au sens de Hardy et Krause de f est

$$V(f) := \sum_{k=1}^s \sum_{\substack{K \subset \{1, \dots, s\} \\ \#K=k}} V^{(k)}(T_{\mathbf{1}}^{K^c} f),$$

où $K^c := \{1, \dots, s\} \setminus K$.

L'analogue de l'inégalité de Koksma est le résultat suivant, dû à E. Hlawka [46] (voir aussi sa présentation dans [130]).

Théorème 1.3 (Koksma-Hlawka) Si f a une variation bornée $V(f)$ sur $\bar{I}^s$ au sens de Hardy et Krause, et si $X := \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ est un ensemble de N points de I^s on a

$$\left| \int_{I^s} f(x) dx - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) \right| \leq V(f) D_N^*(X).$$

1.3.2 Points quasi-aléatoires

L'analyse d'erreur des méthodes quasi-Monte Carlo d'intégration numérique montre que l'utilisation d'ensembles de points à faible discrédance garantit des erreurs petites (pour des fonctions à variation bornée). Dans la suite, il est commode de faire commencer les indices des ensembles ou suites à zéro.

On a vu qu'à une dimension, l'ensemble de N points qui a la plus petite discrédance à l'origine est l'ensemble des points x_n , $0 \leq n < N$, où

$$x_n := \frac{2n+1}{2N}$$

(Proposition 1.3). Cette discrédance vaut $1/2N$.

Concernant les suites infinies, on sait qu'en dimension 1, il n'existe aucune suite dont la discrédance décroisse plus rapidement que $\mathcal{O}((\ln N)/N)$ [98] ; on connaît des suites ayant exactement cette décroissance, comme les suites de Van der Corput dont nous détaillons la construction.

Soit $b \geq 2$ un entier : on note $\mathcal{Z}_b := \{0, 1, \dots, b-1\}$. À un entier $n \geq 0$ on associe son développement en base b :

$$n = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(n) b^j,$$

où $a_j(n) \in \mathcal{Z}_b$ et $a_j(n) = 0$ pour j assez grand.

Définition 1.3 Si $b \geq 2$ est un entier la fonction radicale inverse en base b est définie par

$$\phi_b(n) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(n) b^{-j-1}, \quad n \geq 0.$$

La suite de Van der Corput en base b est la suite $(x_n)_{n \geq 0}$ où

$$x_n := \phi_b(n), \quad n \geq 0.$$

Une extension en dimension quelconque est donnée dans la définition suivante [42].

Définition 1.4 Si $b_1 \geq 2, b_2 \geq 2, \dots, b_s \geq 2$ sont des entiers, la suite de Halton de bases $b_1, b_2, \dots, b_s$ est la suite $(x_n)_{n \geq 0}$ où

$$x_n := (\phi_{b_1}(n), \phi_{b_2}(n), \dots, \phi_{b_s}(n)), \quad n \geq 0.$$

H. Niederreiter a montré dans [98] que si $b_1, \dots, b_s$ sont premiers entre eux deux à deux, la discrédance à l'origine de la suite de Halton S vérifie pour tout $N \geq 2$:

$$D_N^*(S) \leq c_s \frac{(\log N)^s}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log N)^{s-1}}{N}\right),$$

où

$$c_s := \frac{1}{2^s} \prod_{i=1}^s \frac{(b_i - 1)}{\log b_i}.$$

La majoration de la discrédance à l'origine de ces ensembles a été améliorée par Atanassov qui a établi dans [3] une majoration de la discrédance à l'origine avec une constante

$$c'_s := \frac{1}{s! 2^s} \prod_{i=1}^s \frac{(b_i - 1)}{\log b_i},$$

qui tend vers 0 quand s tend vers l'infini.

En se limitant à des ensembles finis, on a l'ensemble de Hammersley de bases $b_1, b_2, \dots, b_{s-1}$ [43] : $(x_n)_{0 \leq n < N}$ où

$$x_n := \left(\frac{n}{N}, \phi_{b_1}(n), \phi_{b_2}(n), \dots, \phi_{b_{s-1}}(n) \right), \quad 0 \leq n < N.$$

Dans le cas où $b_1, \dots, b_{s-1}$ sont premiers entre eux deux à deux, la discrédance à l'origine d'un ensemble de Hammersley à N points est de l'ordre de $(\log N)^{s-1}/N$ [98].

Des comparaisons pratiques des suites de points quasi-aléatoires sont données dans [91].

1.3.3 Réseaux (t, m, s) et suites (t, s)

Actuellement, les ensembles de points qui ont la plus faible discrédance sont obtenus à partir de la théorie des réseaux (t, m, s) et des suites (t, s) en base b [96, 97, 98, 45, 12].

Définition 1.5 Soit $b \geq 2$ un entier.

Un intervalle élémentaire en base b est un intervalle de la forme

$$J = \prod_{i=1}^s \left[\frac{a_i}{b^{d_i}}, \frac{a_i + 1}{b^{d_i}} \right),$$

avec des entiers $d_i \geq 0$ et $0 \leq a_i < b^{d_i}$ pour $1 \leq i \leq s$.

Soient $0 \leq t \leq m$ des entiers. Un ensemble X de b^m points dans I^s est un réseau (t, m, s) en base b si $A(J, X) = b^t$ pour tout intervalle élémentaire J en base b tel que $\lambda_s(J) = b^{t-m}$.

Soit $t \geq 0$ un entier. Une suite infinie $x_0, x_1, \dots$ de points de I^s est une suite (t, s) en base b si, pour tous les entiers $\ell \geq 0$ et $m \geq t$, l'ensemble

$$\{x_n : \ell b^m \leq n < (\ell + 1)b^m\}$$

est un réseau (t, m, s) en base b .

La Figure 1.1 représente les 16 points d'un réseau $(0, 4, 2)$ en base 2 ainsi que les différents intervalles élémentaires en base 2 de volume 2^{-4} . On remarque que chaque intervalle contient exactement 1 point de réseau.

Remarque 1.1 Si X est un réseau (t, m, s) en base b , alors pour $N := b^m$,

$$D_N(J, X) = 0$$

pour tout intervalle élémentaire J en base b tel que $\lambda_s(J) = b^{t-m}$.

Remarque 1.2 Soit $s \geq 1$ un entier.

(1) Si X est un réseau (t, m, s) en base b , alors X est un réseau (u, m, s) en base b , pour tout entier u tel que $t \leq u \leq m$.

(2) Si X est une suite (t, s) en base b , alors X est une suite (u, s) en base b , pour tout entier u tel que $t \leq u$.

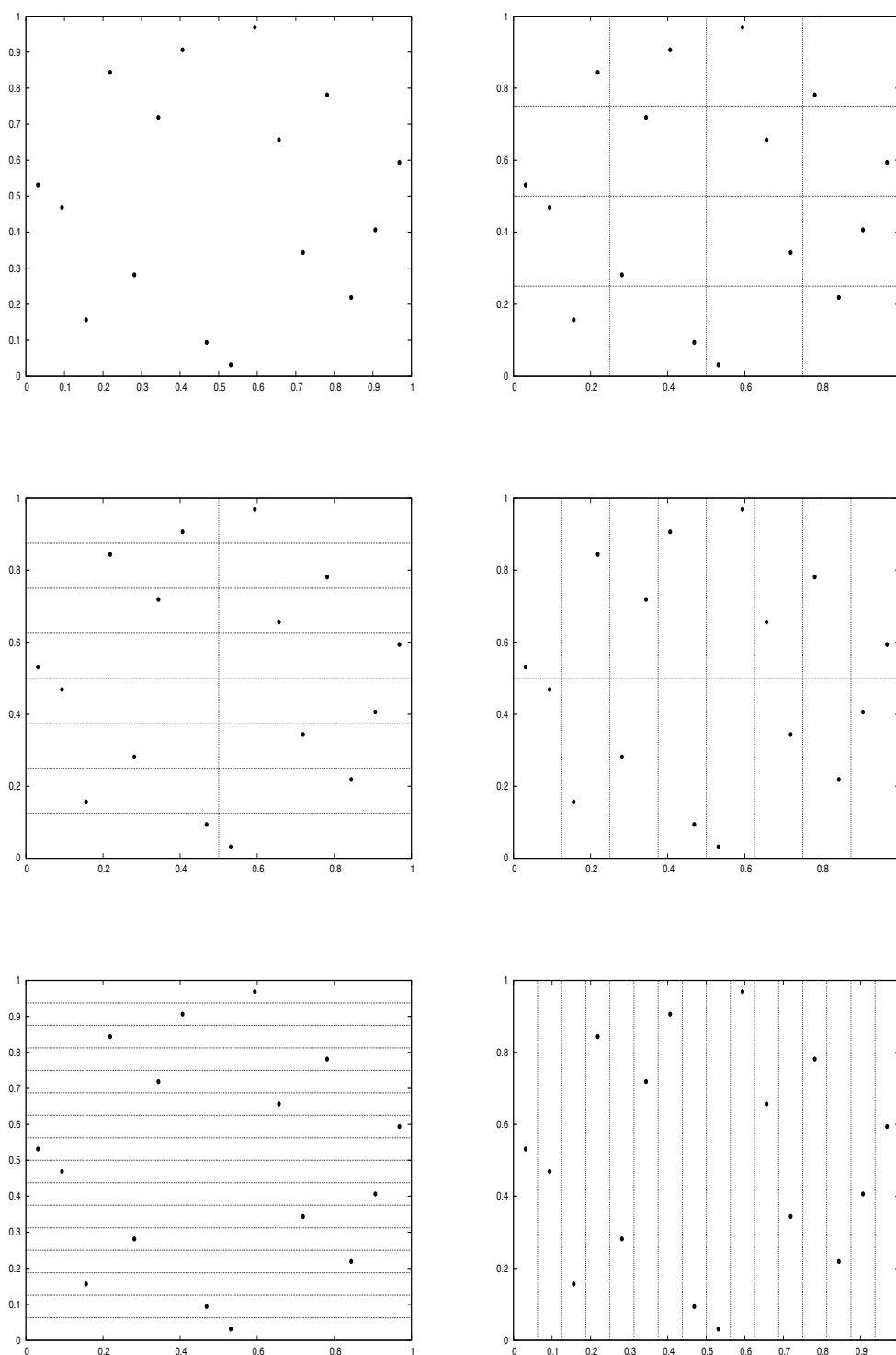


FIGURE 1.1 – Réseau- $(0,4,2)$ en base 2 et intervalles élémentaires de volume 2^{-4} en base 2.

Exemple 1.1 Soit $b \geq 2$ un entier.

(1) Pour tout entier $m \in \mathbb{N}^*$, l'ensemble $\{x_n : 0 \leq n < b^m\}$, où

$$x_n := \frac{2n+1}{2b^m}$$

est un réseau $(0, m, 1)$ en base b .

(2) La suite de Van der Corput en base b est une suite $(0, 1)$ en base b .

Les premiers réseaux et suites en base 2 ont été proposés par Sobol [120]. La généralisation en base quelconque est due à Faure, d'abord en dimension 1 [29], puis en dimension quelconque [30]; voir aussi l'article récent [77].

Définition 1.6 Soit $b \geq 2$ un entier premier et s un entier tel que $s \leq b$. Soient $b_1, b_2, \dots, b_s$ des éléments distincts de $\mathcal{Z}_b$. Une suite de Faure en base b en dimension s est la suite $(x_n)_{n \geq 0}$ où

$$\begin{aligned} x_n &:= (x_{n,1}, x_{n,2}, \dots, x_{n,s}), \\ x_{n,i} &:= \sum_{j=1}^{\infty} y_{n,j}^{(i)} b^{-j}, \\ y_{n,j}^{(i)} &:= \sum_{k=j-1}^{\infty} \binom{k}{j-1} b_i^{k-j+1} a_k(n) \in \mathcal{Z}_b \end{aligned}$$

et

$$n = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(n) b^k, \quad a_k(n) \in \mathcal{Z}_b$$

est le développement en base b de n .

Proposition 1.5 Soit $b \geq 2$ un entier premier et s un entier tel que $s \leq b$. Toute suite de Faure en base b en dimension s est une suite $(0, s)$ en base b .

1.3.4 Suites de Niederreiter

H. Niederreiter a proposé dans [97] un procédé général de construction de suites- (t, s) en base q . On se limite ici au cas où q est une puissance première, c'est-à-dire $q = p^\alpha$ avec p premier et $\alpha \geq 1$. On note $\mathbb{F}_q$ le corps fini à q éléments. On choisit :

- (S1) des bijections $\psi_r : \mathcal{Z}_q \rightarrow \mathbb{F}_q$ pour tout $r \geq 0$, telles que $\psi_r(0) = 0$ pour r suffisamment grand ;
- (S2) des bijections $\eta_{i,j} : \mathbb{F}_q \rightarrow \mathcal{Z}_q$ pour tout $1 \leq i \leq s$ et $j \geq 1$, telles que $\eta_{i,j}(0) = 0$ pour tout $1 \leq i \leq s$ et j suffisamment grand ;
- (S3) des éléments $c_{j,r}^{(i)} \in \mathbb{F}_q$ pour tout $1 \leq i \leq s$, $j \geq 1$ et $r \geq 0$, tels que $c_{j,r}^{(i)} = 0$ pour tout $1 \leq i \leq s$, tout $r \geq 0$ et j suffisamment grand.

On note $\mathbb{F}_q((x^{-1}))$ le corps des séries de Laurent formelles sur $\mathbb{F}_q$. Tout élément $L \in \mathbb{F}_q((x^{-1}))$ s'écrit

$$L = \sum_{k=w}^{\infty} t_k x^{-k},$$

où $w \in \mathbb{Z}$ et $t_k \in \mathbb{F}_q$ pour tout $k \geq w$. On choisit $p_1, \dots, p_s \in \mathbb{F}_q[x]$ des polynômes irréductibles¹, unitaires² distincts. Des tableaux de polynômes irréductibles sont donnés dans les deux livres [78, 79]. On pose $e_i := \deg(p_i)$ pour tout $1 \leq i \leq s$. Pour $1 \leq i \leq s$, $j \geq 1$ et $0 \leq k < e_i$, on écrit le développement en série de Laurent :

$$\frac{x^k}{p_i(x)^j} = \sum_{r=0}^{\infty} a^{(i)}(j, k, r) x^{-r-1}.$$

Ce développement permet de définir pour tout $1 \leq i \leq s$, $j \geq 1$ et $r \geq 0$ des éléments $c_{j,r}^{(i)}$ de $\mathbb{F}_q$:

$$c_{j,r}^{(i)} := a^{(i)}(Q(i, j) + 1, k(i, j), r), \quad (1.3.1)$$

où

$$j - 1 = Q(i, j)e_i + k(i, j) \quad \text{avec } 0 \leq k(i, j) < e_i.$$

On remarque que pour tout $1 \leq i \leq s$ et $r \geq 0$ les éléments $c_{j,r}^{(i)}$ sont nuls pour j suffisamment grand.

On peut maintenant définir la *suite de Niederreiter* $S = \{x_n : n \geq 0\}$ dans I^s . Soit $n \in \mathbb{N}$ et

$$n = \sum_{r=0}^{\infty} a_r(n) q^r$$

son développement en base q , avec $a_r(n) \in \mathcal{Z}_q$ pour $r \geq 0$. Pour tout $n \geq 0$, $1 \leq i \leq s$, soit

$$x_n^{(i)} := \sum_{j=1}^{\infty} y_{n,j}^{(i)} b^{-j},$$

où, pour tout $j \geq 1$

$$y_{n,j}^{(i)} := \eta_{i,j} \left(\sum_{r=0}^{\infty} c_{j,r}^{(i)} \psi_r(a_r(n)) \right) \in \mathcal{Z}_b.$$

Les éléments x_n sont alors définis par :

$$x_n := (x_n^{(1)}, \dots, x_n^{(s)}), \quad n \geq 0.$$

Le résultat fondamental sur ces suites est le suivant.

Théorème 1.4 *La suite de Niederreiter est une suite $(t(q, s), s)$ en base q , où*

$$t(q, s) := \sum_{i=1}^s (e_i - 1).$$

¹Un polynôme est *irréductible* si dans toute factorisation en deux polynômes, l'un est constant.

²Un polynôme est *unitaire* si le coefficient du monôme de plus haut degré est égal à 1.

Afin d'obtenir la meilleure majoration de discrédance, il faut minimiser la valeur de $t(q, s)$ pour s et q fixés. Pour cela on range les polynômes irréductibles unitaires de $\mathbb{F}_q[x]$ par degré croissant : $p_1, p_2, \dots$ et on choisit les s premiers.

CAS PARTICULIER. Dans le cas où q est une puissance première et s une dimension $\leq q$, on peut choisir des polynômes de la forme $p_i(x) = x - b_i$ pour tout $1 \leq i \leq s$, où $b_1, \dots, b_s$ sont des éléments distincts de $\mathbb{F}_q$. Avec ce choix, on a $t(q, s) = 0$.

La relation (1.3.1) s'écrit alors

$$c_{j,r}^{(i)} = a^{(i)}(j, 0, r), \quad 1 \leq i \leq s, \quad j \geq 1, \quad r \geq 0.$$

Ces éléments s'obtiennent en écrivant le développement en série de Laurent :

$$\begin{aligned} \frac{1}{p_i(x)^j} &= \frac{1}{x^j(1 - b_i x^{-1})^j} = x^{-j} \sum_{r=0}^{\infty} \binom{r+j-1}{j-1} b_i^r x^{-r} \\ &= \sum_{r=j-1}^{\infty} \binom{r}{j-1} b_i^{r-j+1} x^{-r-1}. \end{aligned}$$

Il en résulte que, pour $1 \leq i \leq s$ et $j \geq 1$, on a

$$c_{j,r}^{(i)} = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 \leq r < j-1, \\ \binom{r}{j-1} b_i^{r-j+1} & \text{pour } r \geq j-1, \end{cases}$$

en convenant que $0^0 = 1 \in \mathbb{F}_q$. Quand q est premier, on identifie $\mathcal{Z}_q$ à $\mathbb{F}_q$ et on choisit les bijections ψ_r et $\eta_{i,j}$ égales à l'identité : on retrouve alors la construction de H. Faure [30].

Les ensembles digitaux et les suites digitales généralisent les réseaux (t, m, s) et les suites (t, s) [125, 45, 12]. On présente dans ce qui suit leur principe de construction.

(1) Soient $s \geq 1$, $b \geq 2$ et $k \geq 1$ trois entiers. On considère :

- un anneau commutatif unitaire R de cardinal b ;
- des bijections $\psi_r : \mathcal{Z}_b \rightarrow R$, pour $0 \leq r \leq k-1$;
- des bijections $\eta_{j,l} : R \rightarrow \mathcal{Z}_b$, pour $1 \leq j \leq s$ et $1 \leq l \leq k$;
- des matrices (dites *génératrices*) $C_1, \dots, C_s$ de dimension $k \times k$ d'éléments de R .

Pour $i = 0, \dots, b^k - 1$, on écrit la représentation de i en base b :

$$i = \sum_{r=0}^{k-1} a_r b^r,$$

où $a_r \in \mathcal{Z}_b$. Soit

$$y = (\psi_0(a_0), \dots, \psi_{k-1}(a_{k-1}))^t \in R^k$$

et

$$(b_{j,1}, b_{j,2}, \dots, b_{j,k})^t = C_j \cdot y,$$

avec $b_{j,l} \in R$. Pour $j = 1, \dots, s$ soit

$$u_{i,j} = \frac{\eta_{j,1}(b_{j,1})}{b} + \frac{\eta_{j,2}(b_{j,2})}{b^2} + \dots + \frac{\eta_{j,\ell}(b_{j,\ell})}{b^\ell}.$$

L'ensemble $P = \{u_i = (u_{i,1}, \dots, u_{i,s}), i = 0, \dots, b^k - 1\}$ est appelé *réseau digital sur R en base b* .

(2) Soient $s \geq 1$ et $b \geq 2$ deux entiers. On considère :

- un anneau commutatif unitaire R de cardinal b ;
- des bijections $\psi_r : \mathcal{Z}_b \rightarrow R$, pour $r \geq 0$, vérifiant $\psi_r(0) = 0$, pour r suffisamment grand ;
- des bijections $\eta_{j,l} : R \rightarrow \mathcal{Z}_b$, pour $1 \leq j \leq s$ et $l \geq 1$;
- des matrices (dites *génératrices*) $C_1, \dots, C_s$ d'éléments de R , d'indices dans $\mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*$.

Pour $i \geq 0$, on écrit la représentation de i en base b :

$$i = \sum_{r=0}^{\infty} a_r b^r,$$

où $a_r \in \mathcal{Z}_b$. Soit

$$y = (\psi_0(a_0), \psi_1(a_1), \dots)^t \in R^{\mathbb{N}^*}$$

et

$$(b_{j,1}, b_{j,2}, \dots)^t = C_j \cdot y,$$

avec $b_{j,l} \in R$. Pour $j = 1, \dots, s$ soit

$$u_{i,j} = \frac{\eta_{j,1}(b_{j,1})}{b} + \frac{\eta_{j,2}(b_{j,2})}{b^2} + \dots.$$

La suite $P = \{u_i = (u_{i,1}, \dots, u_{i,s}), i \geq 0\}$ est appelée *suite digitale sur R en base b* .

Exemple 1.2 Soient $s \geq 1$ et $b \geq 2$, puissance première supérieure à s . Les suites de Faure généralisées [125] sont obtenues en utilisant la construction précédente dans laquelle les matrices génératrices sont de la forme :

$$C_j = A_j P^{j-1}, \quad j = 1, \dots, s,$$

où P est la transposée de la matrice de Pascal :

$$P_{i,j} := \binom{j-1}{i-1} \in \mathbb{F}_b$$

et A_j est une matrice triangulaire inférieure régulière dont les éléments sont dans $\mathbb{F}_b$. Ces suites sont des suites $(0, s)$ en base b .

La suite de Faure originale est obtenue en prenant b le plus petit entier premier $\geq s$ et les matrices A_j toutes égales à la matrice identité I .

Exemple 1.3 Une construction de suites, élaborée par Faure et Tezuka [31, 126] consiste à multiplier à droite les matrices génératrices des suites (t, s) par des matrices régulières triangulaires supérieures (NUT : non-singular upper triangular). Les nouvelles matrices génératrices sont :

$$C'_j = C_j U_j,$$

où les U_j , $j = 1, \dots, s$ sont des matrices NUT. Comme la multiplication par les matrices U_j ne préserve pas les propriétés de répartition dans les intervalles élémentaires, la suite ainsi obtenue n'est généralement pas de type (t, s) . Une possibilité pour conserver la propriété d'uniformité des suites est de choisir U_j sous la forme :

$$U_j = \gamma_j U,$$

où U est une matrice NUT fixée et $\gamma_j \in \mathbb{F}_b$, $\gamma_j \neq 0$. Les matrices génératrices deviennent alors :

$$C'_j = \gamma_j C_j U.$$

On a le résultat suivant [31] : si une suite (t, s) en base b est engendrée par les matrices génératrices C_j , $1 \leq j \leq s$, alors la suite engendrée avec les matrices $C'_j = \gamma_j C_j U$, $1 \leq j \leq s$ est également une suite (t, s) en base b .

1.4 Hasardisation

Le but des techniques d'hasardisation est de construire des ensembles (ou suites) de points de faible discrédance, vérifiant :

- (1) chaque point dans la suite hasardisée est uniformément distribué sur $[0, 1)^s$,
- (2) la régularité de la suite hasardisée est celle de la suite déterministe de départ.

1.4.1 Méthodes de décalage linéaire

Les procédés les plus simples d'hasardisation sont les décalages linéaires.

Décalage aléatoire modulo 1

Cette méthode d'hasardisation est aussi connue sous le nom de *rotation de Cranley-Patterson* [8]. Soit $P_n := \{u_i ; i = 0, 1, \dots, n-1\}$ un ensemble de points de $[0, 1)^s$ et Δ un vecteur aléatoire s -dimensionnel uniformément distribué sur $[0, 1)^s$. L'ensemble hasardisé $\tilde{P}_n := \{\tilde{u}_i ; i = 0, 1, \dots, n-1\}$ est défini par :

$$\tilde{u}_i = (u_i + \Delta) \mod 1.$$

L'ensemble ainsi obtenu est uniformément distribué sur $[0, 1)^s$. Cependant, cette technique d'hasardisation ne préserve pas les propriétés d'équirépartition de l'ensemble de départ.

Décalage digital b -adique

Soit $P_n := \{u_i ; i = 0, 1, \dots, n-1\}$ un réseau (t, m, s) en base b . Une méthode analogue à la précédente consiste à écrire la représentation b -adique du vecteur Δ et à additionner ses composantes à celles des points u_i , en utilisant les opérations sur $\mathbb{F}_b$ ([85, 48]). Plus précisément, si $\Delta = (\Delta_1, \dots, \Delta_s)$ avec

$$\Delta_j = \sum_{l=1}^{\infty} d_{j,l} b^{-l}, \quad u_{i,j} = \sum_{l=1}^{\infty} u_{i,j,l} b^{-l},$$

on calcule

$$u_i \oplus \Delta = (\tilde{u}_{i,1}, \dots, \tilde{u}_{i,s}),$$

où

$$\tilde{u}_{i,j} = \sum_{l=1}^{\infty} ((u_{i,j,l} + d_{j,l}) \bmod b) b^{-l}.$$

L'ensemble hasardisé est alors $\tilde{P}_n = \{\tilde{u}_i ; i = 0, \dots, n-1\}$. Ce type de décalage digital est le plus approprié aux réseaux (t, m, s) puisqu'il préserve les propriétés d'uniformité et les valeurs du paramètre t .

1.4.2 Ensembles de points à faible discrédance brouillés

Cette méthode a été proposée par Owen dans [109, 110]. L'idée est de perturber les digits des ensembles de points à faible discrédance à l'aide de permutations aléatoires de digits, tout en préservant les propriétés d'équirépartition.

Soit $P = (u_i)_i$ un ensemble de points de $[0, 1]^s$. On considère la représentation b -adique de chacune des composantes du $i^{\text{ème}}$ terme $u_i = (u_{i,1}, \dots, u_{i,s})$ de P :

$$u_{i,j} = \sum_{k=1}^{\infty} u_{i,j,k} b^{-k},$$

où $0 \leq u_{i,j,k} < b, \forall i, j, k$.

La version hasardisée de P est l'ensemble $\tilde{P}$ dont le $i^{\text{ème}}$ élément $\tilde{u}_i = (\tilde{u}_{i,1}, \dots, \tilde{u}_{i,s})$ est donné par :

$$\tilde{u}_{i,j} = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{u}_{i,j,k} b^{-k},$$

où les $\tilde{u}_{i,j,k}$ sont définis comme suit :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,j,1} &= \pi_j(u_{i,j,1}) \\ \tilde{u}_{i,j,2} &= \pi_{j,u_{i,j,1}}(u_{i,j,2}) \\ &\vdots \\ \tilde{u}_{i,j,k} &= \pi_{j,u_{i,j,1}, \dots, u_{i,j,k-1}}(u_{i,j,k}), \end{aligned}$$

les $\pi_{j,u_{i,j,1},\dots,u_{i,j,\ell}} : \mathcal{Z}_b \rightarrow \mathcal{Z}_b$ étant des permutations aléatoires indépendantes uniformément distribuées sur l'ensemble des $b!$ permutations possibles de $\{0, 1, \dots, b-1\}$. Notons que la permutation appliquée au coefficient $u_{i,j,k}$ dépend des valeurs des coefficients $u_{i,j,1}, \dots, u_{i,j,k-1}$. Ce qui fait que l'implémentation numérique de ces méthodes demande des espaces de stockage et des temps de calcul importants.

Dans [110] Owen a montré que si P est un réseau (t, m, s) (respectivement une suite (t, s)) en base b alors $\tilde{P}$ est un réseau (t, m, s) (respectivement une suite (t, s)) en base b presque sûrement et que les points de l'ensemble $\tilde{P}$ sont uniformément distribués sur $[0, 1]^s$.

Des alternatives permettant la réduction de la place mémoire ont été proposées par Matoušek [85], Tezuka [125], Hong et Hickernell [48]. L'idée est d'appliquer des permutations affines aux différents coefficients comme suit. Si $n = b^k$, on considère :

- s matrices régulières triangulaires inférieures $L_1, \dots, L_s$, à indices dans $\mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*$, dont les éléments sont choisis aléatoirement et indépendamment dans $\mathbb{F}_b$, avec des éléments diagonaux non nuls ;
- s vecteurs (à indice dans $\mathbb{N}^*$) $d_1, \dots, d_s$ dont les composantes sont indépendantes et uniformément distribuées dans $\mathbb{F}_b$.

Les coefficients $\tilde{u}_{i,j,1}, \tilde{u}_{i,j,2} \dots$ de la $j^{\text{ème}}$ composante $\tilde{u}_{i,j}$ de l'élément $\tilde{u}_i$ sont donnés par :

$$\begin{pmatrix} \tilde{u}_{i,j,1} \\ \tilde{u}_{i,j,2} \\ \vdots \end{pmatrix} = L_j \begin{pmatrix} u_{i,j,1} \\ u_{i,j,2} \\ \vdots \end{pmatrix} + d_j, \quad (1.4.1)$$

toutes ces opérations étant effectuées dans $\mathbb{F}_b$. Le décalage digital garantit que chaque point obtenu est uniformément distribué dans $[0, 1]^s$ [111]. Cette technique préserve les propriétés d'équirépartition de l'ensemble original. En effet, dans [86] Matoušek a montré que la valeur du paramètre t de la suite ainsi obtenue ne dépasse pas celle de la suite originale, le brouillage peut donc potentiellement améliorer la qualité de la suite.

Dans nos essais numériques, nous nous sommes intéressés tout particulièrement à trois types d'hasardisation par permutations affines. Elles diffèrent par le choix des matrices L_j :

- La matrice de brouillage linéaire aléatoire de Matoušek (*Matoušek scrambling*) [85] :

$$\begin{pmatrix} h_{11} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ g_{21} & h_{22} & 0 & 0 & \dots \\ g_{31} & g_{32} & h_{33} & 0 & \dots \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & h_{44} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}$$

- La matrice de brouillage I -binomial de Tezuka (*Tezuka scrambling*) [126] :

$$\begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ g_2 & h_1 & 0 & 0 & \dots \\ g_3 & g_2 & h_1 & 0 & \dots \\ g_4 & g_3 & g_2 & h_1 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}$$

- La matrice de brouillage d'Owen (*Owen scrambling*) [111] :

$$\begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ h_1 & h_2 & 0 & 0 & \dots \\ h_1 & h_2 & h_3 & 0 & \dots \\ h_1 & h_2 & h_3 & h_4 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}$$

1.5 Essais numériques

Il s'agit dans cette partie de valider les approches quasi-Monte Carlo hasardisées et de les comparer aux schémas de Monte Carlo et quasi-Monte Carlo traditionnels dans des essais numériques.

Nous nous limitons au calcul d'intégrales multi-dimensionnelles dont la valeur exacte est connue par les trois méthodes citées ci-dessus. Nous traçons les courbes d'erreur puis évaluons les valeurs des variances, pour différentes dimensions. La différence entre les trois méthodes est due à la nature des points utilisés dans les simulations.

- Pour les essais du type Monte Carlo, nous utilisons le générateur de nombres pseudo-aléatoires **MRG32k3a**, mis au point par L'Ecuyer [55].
- La suite déterministe utilisée dans les essais QMC est celle de Faure [30].
- Pour les suites QMC hasardisées, nous utilisons la suite de Faure hasardisée par les méthodes de Matoušek, *I*-binomiale et d'Owen détaillées au paragraphe précédent.

Le nombre N de points considérés est une puissance de la base b où b est le plus petit entier supérieur à la dimension s .

Les intégrales calculées sont les suivantes :

$$J_s = \int_{[0,1]^s} \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s |4x_i - 2| dx_1 \dots dx_s,$$

$$I = \int_{[0,1]^4} (e^{x_1 x_2 x_3 x_4} - 1) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4.$$

Les valeurs exactes de ces intégrales sont :

$$J_s = 1, \quad \forall s \geq 1 \quad \text{et} \quad I = \frac{5}{4} - 2 \log 2 + \frac{\pi^2}{24}.$$

On calcule l'erreur, qui est la valeur absolue de la différence entre la valeur exacte et la valeur approchée.

1.5.1 Estimation de J_s

On calcule des valeurs approchées de l'intégrale J_s pour différentes valeurs de s . Les résultats sont représentés sur les Figures 1.2, 1.3, 1.4 et 1.5 pour $s = 4, 8, 12$ et 18 , respectivement.

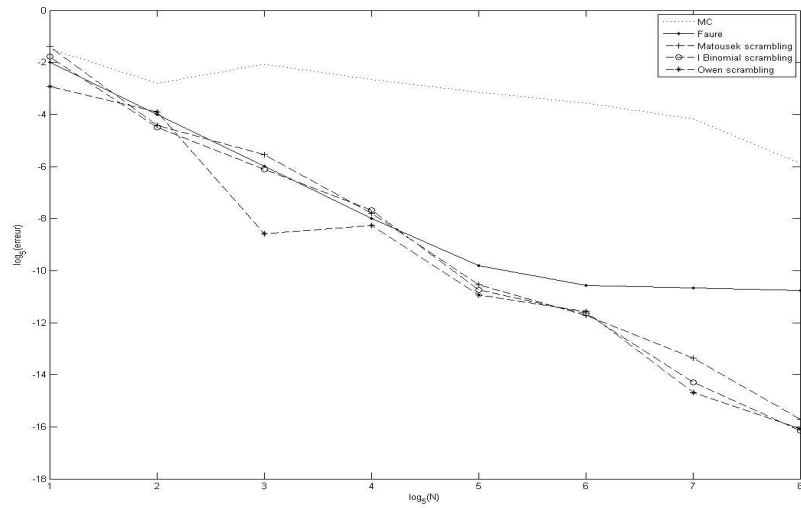


FIGURE 1.2 – Calcul de J_4 . Erreur des méthodes de MC, QMC et QMC hasardisées (échelles logarithmiques en base 5). Le nombre de points N varie entre 5^1 et 5^8 .

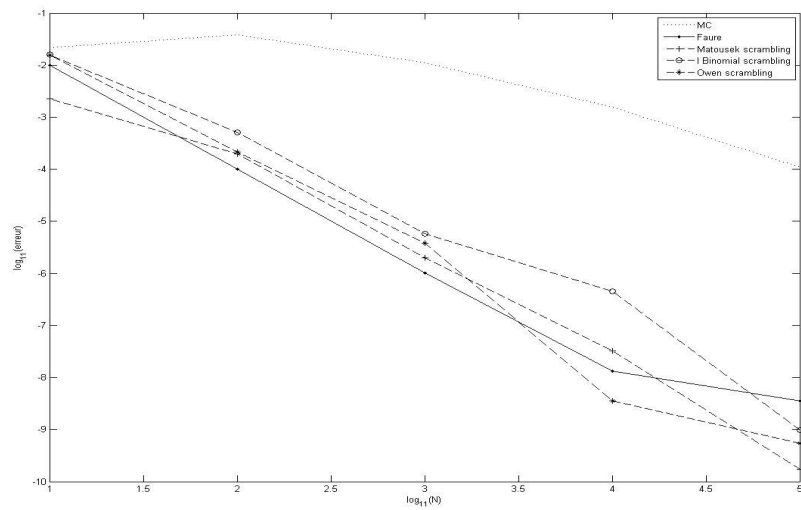


FIGURE 1.3 – Calcul de J_8 . Erreur des méthodes de MC, QMC et QMC hasardisées (échelles logarithmiques en base 11). Le nombre de points N varie entre 11^1 et 11^5 .

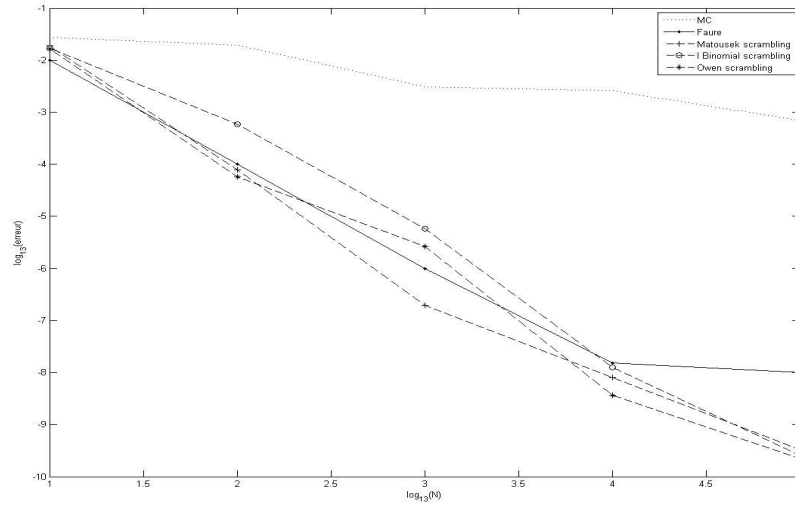


FIGURE 1.4 – Calcul de J_{12} . Erreur des méthodes de MC, QMC et QMC hasardisées (échelles logarithmiques en base 13). Le nombre de points N varie entre 13^1 et 13^5 .

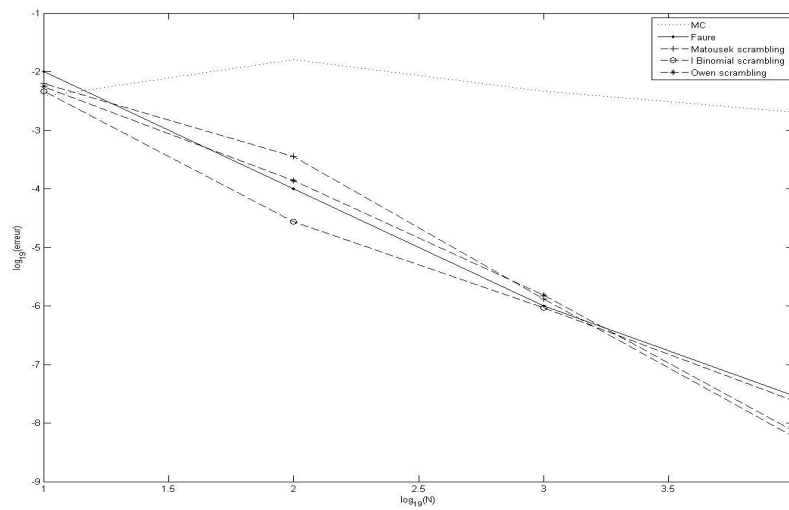


FIGURE 1.5 – Calcul de J_{18} . Erreur des méthodes de MC, QMC et QMC hasardisées (échelles logarithmiques en base 19). Le nombre de points N varie entre 19^1 et 19^4 .

TABLE 1.2 – Variance des estimateurs de J_s .

Dimension s	4	8	12	18
Nombre de points N	$5^8 = 390\,625$	$11^5 = 161\,051$	$13^5 = 371\,293$	$19^4 = 130\,321$
Méthode				
Monte Carlo	$1,56 \times 10^{-7}$	$1,97 \times 10^{-7}$	$9,31 \times 10^{-7}$	$1,23 \times 10^{-7}$
Matousěk	$1,37 \times 10^{-22}$	$1,37 \times 10^{-18}$	$1,75 \times 10^{-18}$	$2,60 \times 10^{-19}$
I-Binomial	$2,45 \times 10^{-14}$	$2,81 \times 10^{-18}$	$5,77 \times 10^{-17}$	$6,25 \times 10^{-21}$
Owen	$2,07 \times 10^{-14}$	$6,13 \times 10^{-21}$	$6,37 \times 10^{-18}$	$1,80 \times 10^{-20}$

TABLE 1.3 – Variance des estimateurs de I pour $N = 5^8 = 390\,625$.

Méthode	Variance
Monte Carlo	$1,22 \times 10^{-7}$
Matousěk	$8,23 \times 10^{-16}$
I-Binomial	$3,70 \times 10^{-16}$
Owen	$6,15 \times 10^{-16}$

Les résultats montrent que les résultats obtenus par les méthodes QMC et QMC hasardisées sont nettement meilleurs que ceux obtenus par la méthode MC.

Pour estimer la variance de l'estimateur des approches MC et QMC hasardisées, nous répétons le calcul de l'intégrale J_s de façon indépendante $M = 100$ fois pour chaque dimension. Nous obtenons ainsi des copies indépendantes :

$$\hat{J}_{s,1}, \hat{J}_{s,2}, \dots, \hat{J}_{s,100}$$

de l'estimateur. La variance est alors estimée par la variance empirique de l'échantillon ainsi obtenu. Les résultats sont donnés dans la Table 1.2 (on a choisi le plus grand nombre N de points).

Il est clair que la substitution des suites aléatoires par des suites hasardisées permet de réduire la variance.

1.5.2 Estimation de I

De même, l'intégrale I calculée par les différentes méthodes montre une nette amélioration due à l'utilisation des suites hasardisées par rapport aux résultats obtenus avec la suite de Faure ou une approximation MC traditionnelle (voir Figure 1.6).

De même, la variance des estimateurs obtenus par les méthodes QMC hasardisées est plus petite que celle de la méthode MC, comme le montre la Table 1.3. On a choisi le plus grand nombre N de points et on a calculé la variance échantillonnale, pour $M = 100$ répétitions indépendantes.

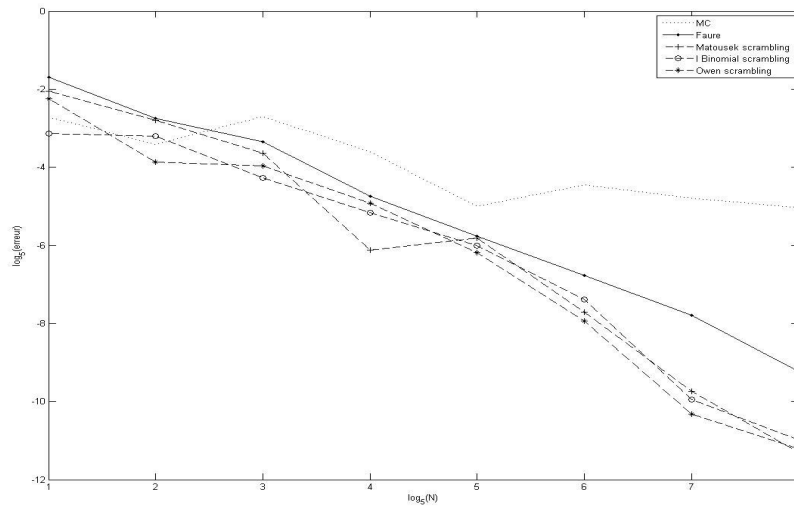


FIGURE 1.6 – Calcul de I . Erreurs par les méthodes de MC, QMC et QMC hasardisées (échelles logarithmiques en base 5). Le nombre de points N varie entre 5^1 et 5^8 .

1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, on a présenté les méthodes de Monte Carlo et quasi-Monte Carlo pour l'intégration numérique. Ensuite, on a décrit des méthodes d'hasardisation des suites déterministes. On a testé l'efficacité de ces dernières méthodes dans des essais numériques d'évaluation d'intégrales multi-dimensionnelles en les comparant aux méthodes de Monte Carlo et quasi-Monte Carlo traditionnelles.

On a remarqué que les versions hasardisées des méthodes QMC permettent d'améliorer les résultats. En fait les erreurs obtenues sont généralement plus petites que celles obtenues par une méthode MC classique, de même que les variances des estimateurs correspondants.

Nous rappelons que le développement des méthodes de Monte Carlo et quasi-Monte Carlo peut être suivi dans deux séries de biennales. La première est celle des conférences internationales *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods* [101, 105, 102, 27, 99, 103, 50, 58, 112, 13]. La seconde est celle des congrès *IMACS Seminar on Monte Carlo Methods* [5, 14, 25, 114, 84, 2, 16, 115].

Chapitre 2

Les méthodes de Monte Carlo stratifiées et LHS

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous commençons par introduire les méthodes de Monte Carlo stratifiées. Ensuite nous nous intéressons à un cas particulier de stratification pour évaluer des intégrales et plus précisément, les intégrales de fonctions indicatrices, car certaines méthodes de simulation peuvent être interprétées comme des successions de quadratures multi-dimensionnelles : voir par exemple [64, 68, 73, 74]. Nous proposons donc un estimateur de Monte Carlo stratifié (MCS) simple et nous analysons l'ordre de convergence de la variance pour le calcul d'un volume multi-dimensionnel. Ensuite nous présentons la méthode d'échantillonnage par hypercube latin (LHS : *Latin Hypercube Sampling*). Nous majorons la variance de l'estimateur du volume d'un rectangle à côtés parallèles aux axes de coordonnées. Nous présentons les résultats de quelques essais numériques qui permettent d'une part de valider l'étude théorique faite et d'autre part de comparer l'efficacité de ces méthodes à celle du MC classique. Une partie des résultats de ce chapitre a été publiée dans [23].

2.2 Méthode de Monte Carlo stratifiée

Soit $s \geq 1$ un entier, λ_s la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{R}^s$ et $I^s := [0, 1]^s$ l'hypercube unité s -dimensionnel. On considère une fonction de carré intégrable $f : I^s \rightarrow \mathbb{R}$ dont on veut évaluer l'intégrale

$$\mathcal{J} := \int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x).$$

La méthode de Monte Carlo usuelle consiste à considérer une famille indépendante de variables aléatoires $\{U_1, \dots, U_N\}$ de loi uniforme sur I^s . L'*estimateur de Monte Carlo simple* de $\mathcal{J}$ est alors

$$X := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f \circ U_k.$$

C'est un estimateur sans biais puisque

$$\mathbf{E}[X] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{E}[f \circ U_k] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x) = \mathcal{J}.$$

Par ailleurs, la famille $\{f \circ U_1, \dots, f \circ U_N\}$ étant indépendante, on a

$$\mathbf{Var}(X) = \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N \mathbf{Var}(f \circ U_k),$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(f \circ U_k) &= \int_{\Omega} \left(f \circ U_k(\omega) \right)^2 d\mathbf{P}(\omega) - \left(\int_{\Omega} f \circ U_k(\omega) d\mathbf{P}(\omega) \right)^2 \\ &= \int_{I^s} (f(x))^2 d\lambda_s(x) - \left(\int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2. \end{aligned}$$

D'où

$$\mathbf{Var}(X) = \frac{1}{N} \int_{I^s} (f(x))^2 d\lambda_s(x) - \frac{1}{N} \left(\int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2 = \frac{\sigma^2(f)}{N}, \quad (2.2.1)$$

où $\sigma^2(f)$ est associé à la probabilité $\mathbf{1}_{I^s}(x)\lambda_s$ par (1.2.1).

2.2.1 Stratification simple

Le principe de la stratification consiste à subdiviser le domaine d'intégration I^s en des sous-ensembles et à engendrer des variables aléatoires dans chacun d'eux, ce qui garantit une meilleure répartition des points. Dans la méthode que nous allons présenter, nous engendrons une variable aléatoire dans chacun des sous-domaines.

Soit $\{C_1, \dots, C_N\}$ une partition de I^s , c'est-à-dire une famille de sous-ensembles de I^s vérifiant :

$$I^s = \bigcup_{k=1}^N C_k \quad \text{et} \quad \forall k, \ell \in \{1, 2, \dots, N\} \quad k \neq \ell \Rightarrow C_k \cap C_\ell = \emptyset.$$

On suppose de plus que ces sous-ensembles ont la même mesure :

$$\lambda_s(C_1) = \dots = \lambda_s(C_N) = \frac{1}{N}.$$

Pour $1 \leq k \leq N$, soit V_k une variable aléatoire de loi uniforme sur C_k . On suppose que la famille $\{V_1, \dots, V_N\}$ est indépendante. L'estimateur de Monte Carlo stratifié simple de $\mathcal{J}$ est défini par

$$Y := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f \circ V_k.$$

Il s'agit d'un estimateur sans biais de $\mathcal{J}$. En effet

$$\begin{aligned}\mathbf{E}[Y] &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{E}[f \circ V_k] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \int_{\Omega} f \circ V_k(\omega) d\mathbf{P}(\omega) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\lambda_s(C_k)} \int_{\mathbb{R}^s} f(x) \mathbf{1}_{C_k}(x) d\lambda_s(x) = \sum_{k=1}^N \int_{C_k} f(x) d\lambda_s(x) = \mathcal{J}.\end{aligned}$$

Cette technique de stratification a été initialement proposée par Haber [40] et analysée dans [40] et [6]. On a d'abord (voir plus loin) : pour toute fonction f de carré intégrable

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \mathbf{Var}(X).$$

Dans [40], Haber a introduit la notion de régularité d'intervalle. Soit

$$H = \prod_{i=1}^s [a_i, b_i)$$

un intervalle dans I^s ; son *module de régularité* est défini par

$$\rho(H) = \frac{\prod_{i=1}^s (b_i - a_i)}{\max_{1 \leq i \leq s} (b_i - a_i)^s}.$$

Une famille $(H_\ell)_\ell$ d'intervalles est dite *régulière* s'il existe une valeur ρ_0 telle que

$$\forall \ell \quad \rho(H_\ell) \geq \rho_0.$$

Il a alors établi les deux résultats suivants.

Proposition 2.1 *Soit f une fonction continue sur I^s ; si la famille*

$$\{C_k : 1 \leq k \leq N, N \in \mathbb{N}^*\}$$

des intervalles de la partition de I^s , pour tous les N , est régulière, alors

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{Var}(Y)}{\mathbf{Var}(X)} = 0.$$

Proposition 2.2 *Soit f une fonction dérivable sur I^s telle que Df soit continue et bornée sur I^s ; si la famille $\{C_k : 1 \leq k \leq N, N \in \mathbb{N}^*\}$ est régulière, alors il existe deux constantes positives K_1 et K_2 (indépendantes de f) telles que pour tout $\epsilon > 0$*

$$\begin{aligned}\frac{K_1 - \epsilon}{\sqrt{12}} \left(\int_{I^s} \|Df(x)\|_2^2 d\lambda_s(x) \right)^{1/2} \frac{1}{N^{1/2+1/s}} \\ \leq \sqrt{\mathbf{Var}(Y)} \leq \\ \frac{K_2 + \epsilon}{\sqrt{12}} \left(\int_{I^s} \|Df(x)\|_2^2 d\lambda_s(x) \right)^{1/2} \frac{1}{N^{1/2+1/s}},\end{aligned}$$

pour N suffisamment grand. Dans le cas de partitions avec des hypercubes, $K_1 = K_2 = 1$.

Cheng et Davenport ont établi dans [6] un résultat analogue :

Proposition 2.3 *Soit f une fonction lipschitzienne sur I^s ; si la famille $\{C_k : 1 \leq k \leq N\}$ est formée d'hypercubes, alors*

$$\mathbf{Var}(Y) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1+2/s}}\right).$$

Nous allons d'abord comparer les variances des estimateurs X et Y dans un cas général (en supposant f de carré intégrable). Puisque la famille $\{f \circ V_1, \dots, f \circ V_N\}$ est indépendante, on a

$$\mathbf{Var}(Y) = \mathbf{Var}\left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f \circ V_k\right) = \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N \mathbf{Var}(f \circ V_k).$$

Or

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(f \circ V_k) &= \int_{\Omega} (f \circ V_k(\omega))^2 d\mathbf{P}(\omega) - \left(\int_{\Omega} f \circ V_k(\omega) d\mathbf{P}(\omega) \right)^2 \\ &= \frac{1}{\lambda_s(C_k)} \int_{\mathbb{R}^s} (f(x))^2 \mathbf{1}_{C_k}(x) d\lambda_s(x) - \left(\frac{1}{\lambda_s(C_k)} \int_{\mathbb{R}^s} f(x) \mathbf{1}_{C_k}(x) d\lambda_s(x) \right)^2 \\ &= N \int_{C_k} (f(x))^2 d\lambda_s(x) - N^2 \left(\int_{C_k} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2. \end{aligned}$$

On a, d'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$\left(\int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2 \leq N \sum_{k=1}^N \left(\int_{C_k} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2,$$

et par suite

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(Y) &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \int_{C_k} (f(x))^2 d\lambda_s(x) - \sum_{k=1}^N \left(\int_{C_k} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2 \\ &= \frac{1}{N} \int_{I^s} (f(x))^2 d\lambda_s(x) - \sum_{k=1}^N \left(\int_{C_k} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2 \\ &\leq \frac{1}{N} \int_{I^s} (f(x))^2 d\lambda_s(x) - \frac{1}{N} \left(\int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x) \right)^2. \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

En comparant (2.2.1) et (2.2.2), on obtient :

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \mathbf{Var}(X).$$

La méthode de Monte Carlo stratifiée proposée par Haber [40] est donc bien une technique de réduction de la variance.

2.2.2 Estimation de l'intégrale d'une indicatrice

Dans ce paragraphe, on cherche à majorer la variance de l'estimateur MCS dans le cas où l'intégrande est une fonction indicatrice. On se limitera à considérer un échantillonnage stratifié particulier dans lequel les sous-domaines sont des pavés identiques : on appelle cette méthode la *méthode de Monte Carlo stratifiée simple*.

Soit A un sous-ensemble mesurable de I^s . On restreint l'étude au cas où $f := \mathbf{1}_A$. Il est clair que dans ce cas $\mathcal{J} = \lambda_s(A)$. On note X l'estimateur de Monte Carlo de $\mathcal{J}$:

$$X := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{1}_A \circ U_k,$$

où $N \in \mathbb{N}^*$ et $\{U_1, \dots, U_N\}$ est une famille indépendante de variables aléatoires de loi uniforme sur I^s . L'expression (2.2.1) donne

$$\mathbf{Var}(X) = \frac{1}{N} \lambda_s(A)(1 - \lambda_s(A)) \leq \frac{1}{4N}.$$

On veut majorer la variance d'un cas particulier de l'estimateur de Monte Carlo stratifié de Haber [40]. On suppose qu'il existe un entier $n \in \mathbb{N}^*$ tel que $N = n^s$. Pour $k = (k_1, \dots, k_s) \in \mathbb{N}^s$ avec $1 \leq k_i \leq n$, on note

$$C_k = \prod_{i=1}^s \left[\frac{k_i - 1}{n}, \frac{k_i}{n} \right)$$

et on considère une variable aléatoire V_k uniformément distribuée dans C_k . On suppose que la famille $\{V_k : k = (k_1, \dots, k_s) \in \mathbb{N}^s, 1 \leq k_i \leq n\}$ est indépendante : cf. Figure 2.1.

L'ensemble des N points ainsi construit possède la propriété d'indépendance et dans chacun des pavés de la subdivision, il y a un point unique. L'estimateur de Monte Carlo stratifié est défini par

$$Y := \frac{1}{N} \sum_k \mathbf{1}_A \circ V_k$$

où k parcourt l'ensemble $\{k = (k_1, \dots, k_s) \in \mathbb{N}^s : 1 \leq k_i \leq n\}$.

Pour calculer la variance de Y , on impose une condition de régularité sur le domaine A . On introduit les deux ensembles suivants (cf. Figure 2.2) : pour tout réel $\varepsilon > 0$, soit

$$A_\varepsilon := \{x \in I^s : \exists y \in A ; \|x - y\|_\infty < \varepsilon\}$$

et

$$A_{-\varepsilon} := \{x \in I^s : \forall y \in I^s \setminus A ; \|x - y\|_\infty \geq \varepsilon\}.$$

Ces notions ont été introduites par Niederreiter et Wills [104] et reprises par Lécot [64], dans un contexte quasi-Monte Carlo dans les deux cas. On a évidemment les inclusions

$$A_{-\varepsilon} \subset A \subset A_\varepsilon.$$

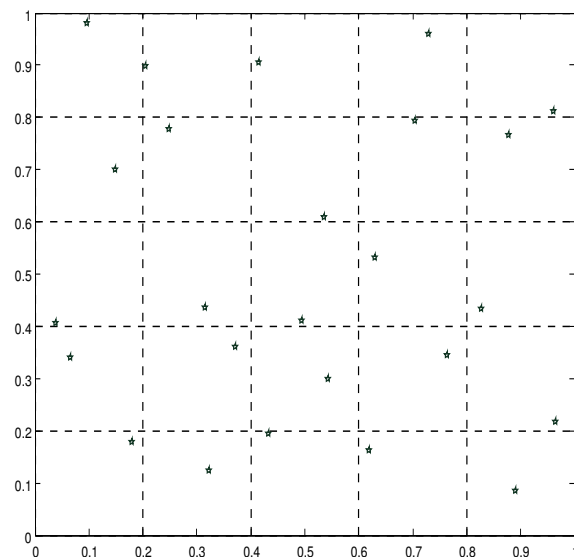


FIGURE 2.1 – Un exemple de stratification simple en dimension 2, avec 5^2 points.

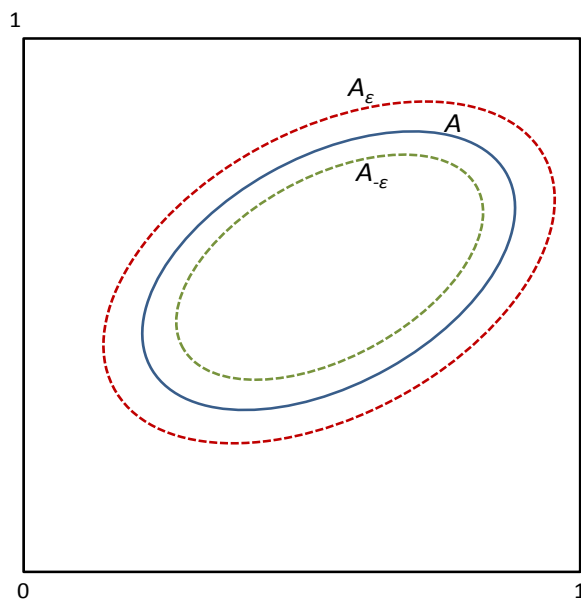


FIGURE 2.2 – Domaine A et les ensembles dilatés/rétractés associés.

Proposition 2.4 *S'il existe une fonction positive et croissante γ définie sur $[0, +\infty)$ telle que*

$$\max(\lambda_s(A_\varepsilon \setminus A), \lambda_s(A \setminus A_{-\varepsilon})) \leq \gamma(\varepsilon),$$

alors

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \frac{1}{2N} \gamma\left(\frac{1}{N^{1/s}}\right).$$

Preuve. Soit

$$\mathcal{K} = \{k = (k_1, \dots, k_s) \in \mathbb{N}^s : 1 \leq k_i \leq n, C_k \cap A \neq \emptyset \text{ et } C_k \not\subset A\}.$$

Pour $k \in \mathcal{K}$ on a $C_k \subset A_{1/n} \setminus A_{-1/n}$. En effet,

- d'une part, si $x \in C_k$, comme $C_k \cap A \neq \emptyset$, il existe $y \in A$ tel que

$$\|x - y\|_\infty < \frac{1}{n}$$

et donc $x \in A_{1/n}$;

- d'autre part, si $x \in C_k$, comme $C_k \not\subset A$, il existe $y \in I^s$ avec $y \in C_k$ et $y \notin A$ donc

$$\|x - y\|_\infty < \frac{1}{n} \quad \text{et} \quad y \in I^s \setminus A$$

et donc $x \notin A_{-1/n}$.

Par conséquent

$$\bigcup_{k \in \mathcal{K}} C_k \subset A_{1/n} \setminus A_{-1/n}.$$

Il en résulte que

$$\frac{1}{N} \#\mathcal{K} \leq 2\gamma\left(\frac{1}{n}\right),$$

où $\#\mathcal{K}$ désigne le cardinal de $\mathcal{K}$.

La famille des variables aléatoires V_k étant indépendante, on a

$$\mathbf{Var}(Y) = \frac{1}{N^2} \sum_k \mathbf{Var}(\mathbf{1}_A \circ V_k) = \frac{1}{N^2} \sum_k N\lambda_s(C_k \cap A)(1 - N\lambda_s(C_k \cap A)).$$

En remarquant que le terme $\lambda_s(C_k \cap A)(1 - N\lambda_s(C_k \cap A))$ est nul si $C_k \cap A = \emptyset$ ou si $C_k \subset A$, la variance de Y s'écrit

$$\mathbf{Var}(Y) = \frac{1}{N^2} \sum_{k \in \mathcal{K}} N\lambda_s(C_k \cap A)(1 - N\lambda_s(C_k \cap A)). \quad (2.2.3)$$

D'où, en remarquant que

$$0 \leq N\lambda_s(C_k \cap A) \leq 1$$

et que la fonction

$$x \in [0, 1] \rightarrow x(1 - x)$$

atteint son maximum de $1/4$ en $1/2$,

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \frac{1}{4N^2} \#\mathcal{K},$$

et le résultat suit. $\square$

Remarque 2.1 *Sous les hypothèses de la proposition précédente, si γ est une fonction linéaire, on obtient :*

$$\mathbf{Var}(Y) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1+1/s}}\right),$$

ce qui montre un gain de $N^{-1/s}$ par rapport à la méthode MC classique.

Dans [6], Cheng et Davenport ont étudié le cas particulier où

$$A = A_{f,y} := \{x \in I^s : f(x) \leq y\},$$

avec $f : I^s \rightarrow \mathbb{R}$ et $y \in \mathbb{R}$. On note

$$S_{f,y} := \{x \in I^s : f(x) = y\}.$$

Ils ont alors établi le résultat suivant.

Proposition 2.5 *On suppose que $S_{f,y}$ est fermée et que*

$$\forall i, j \in \{1, 2, \dots, s\} \quad \frac{\partial f}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

sont uniformément continues sur $S_{f,y}$. On suppose qu'il existe $\lambda > 0$ et $i \in \{1, 2, \dots, s\}$ tels que

$$\forall x \in S_{f,y} \quad \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) \right| = \max_{1 \leq j \leq s} \left| \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) \right| \geq \lambda.$$

Si la famille $\{C_k : 1 \leq k \leq N\}$ est formée d'hypercubes, alors

$$\mathbf{Var}(Y) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{1+1/s}}\right).$$

Le résultat reste valable si l'on suppose que $S_{f,y}$ est une union finie de sous-ensembles S_ℓ ayant les propriétés indiquées dans les hypothèses de la proposition.

Parce qu'ils apparaissent dans les simulations Monte Carlo d'équations, on considère dans cette étude des ensembles dont la frontière peut être paramétrée par une fonction régulière. Soit $f : \bar{I}^{s-1} \rightarrow \bar{I}$ une fonction borélienne et

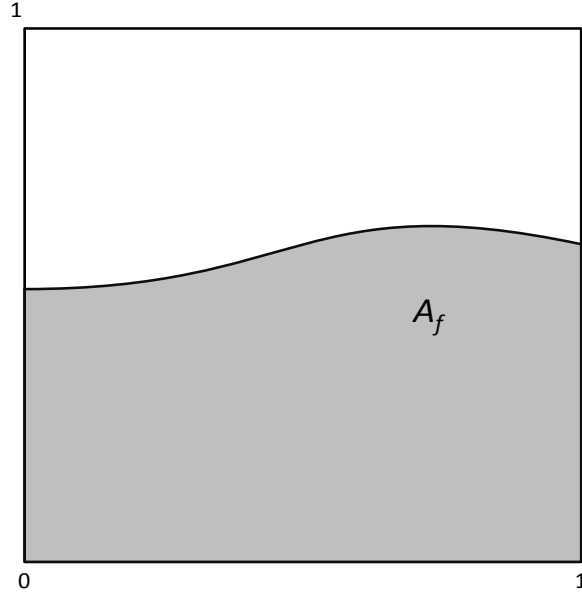
$$A_f := \{(x', x_s) \in I^s : x_s < f(x')\}$$

(cf. Figure 2.3). On veut estimer l'intégrale

$$\mathcal{I} = \int_{I^s} \mathbf{1}_{A_f}(x) d\lambda_s(x) = \int_{I^{s-1}} f(x') d\lambda_{s-1}(x').$$

L'objectif est d'établir une majoration de la variance de l'estimateur MCS de $\mathcal{I}$ semblable à celui de la proposition 2.4 mais avec une condition sur la fonction f et non sur l'ensemble A_f . On utilise la notion de variation au sens de Hardy-Krause de f , introduite dans le premier chapitre.

On a le résultat suivant [65].

FIGURE 2.3 – Graphe d’une fonction f et domaine A_f correspondant en dimension $s = 2$.

Lemme 2.1 Soit f une fonction définie sur $\bar{I}^s$ et à variation bornée au sens de Hardy et Krause. Soient $n_1, \dots, n_s$ des entiers. Pour $k = (k_1, \dots, k_s) \in \mathbb{N}^s$ avec $1 \leq k_i \leq n_i$, on note

$$C_k = \prod_{i=1}^s \left[\frac{k_i - 1}{n_i}, \frac{k_i}{n_i} \right).$$

Pour chaque k , soient $y_k, z_k \in \bar{C}_k$. Alors

$$\sum_k |f(z_k) - f(y_k)| \leq V(f) \prod_{i=1}^s n_i \sum_{i=1}^s \frac{1}{n_i}.$$

Preuve. Si $y \in \bar{I}^s$ soit $T_y^i f$ la restriction de f à l’hyperplan $x_i = y_i$. Si $y, z \in \bar{I}^s$ soit

$$\Delta_{y,z}^i f := T_z^i f - T_y^i f.$$

Si $K = \{i_1, \dots, i_\alpha\} \subset [1, s]$, on pose

$$T_y^K f = T_y^{i_1} \dots T_y^{i_\alpha} f \quad \text{et} \quad \Delta_{y,z}^K f = \Delta_{y,z}^{i_1} \dots \Delta_{y,z}^{i_\alpha} f.$$

On note $T_y f = T_y^{[1,s]} f$. Soit

$$\mathbf{1} := (1, \dots, 1), \quad k+ := (k_1 + 1, \dots, k_s + 1), \quad x_k := \left(\frac{k_1 - 1}{n_1}, \dots, \frac{k_s - 1}{n_s} \right).$$

En combinant les identités suivantes :

$$\begin{aligned}
 f(z_k) - f(y_k) &= \sum_{i=1}^s \Delta_{y_k, z_k}^i T_{y_k}^{\{1, \dots, i-1\}} T_{z_k}^{\{i+1, \dots, s\}} f, \\
 T_w f &= \sum_{\alpha=0}^s (-1)^\alpha \sum_{\substack{K \subset [1, s] \\ \#K=\alpha}} \Delta_{w, x_{k+}}^K T_{x_{k+}}^{K^c} f, \quad \text{pour } w \in \overline{C_k}, \\
 T_{x_{k+}} f &= \sum_{\alpha=0}^s (-1)^\alpha \sum_{\substack{K \subset [1, s] \\ \#K=\alpha}} \sum_{\substack{k_i < \ell_i \leq n_i \\ i \in K}} \Delta_{x_\ell, x_{\ell+}}^K T_{\mathbf{1}}^{K^c} f.
 \end{aligned}$$

On obtient le résultat annoncé. $\square$

Une majoration de la variance de l'estimateur MCS de $\mathcal{I}$ est la suivante.

Proposition 2.6 *Soit $f : \bar{I}^{s-1} \rightarrow \bar{I}$ une fonction à variation bornée au sens de Hardy et Krause et $\{V_k : 1 \leq k_i \leq n\}$ une famille indépendante de N variables aléatoires, où V_k est de loi uniforme sur C_k . Soit*

$$Y := \frac{1}{N} \sum_k \mathbf{1}_{A_f} \circ V_k.$$

Alors

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \left(\frac{s-1}{4} V(f) + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{N^{1+1/s}}.$$

Preuve. Pour $k = (k_1, \dots, k_s) \in \mathbb{N}^s$ avec $1 \leq k_i \leq n$, on note $k' = (k_1, \dots, k_{s-1})$ et

$$C'_{k'} := \prod_{i=1}^{s-1} \left[\frac{k_i - 1}{n}, \frac{k_i}{n} \right).$$

Un calcul analogue à celui effectué pour établir l'identité (2.2.3) donne

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \frac{1}{4N^2} \sum_{k'} \# \{k_s : C_{(k', k_s)} \cap A_f \neq \emptyset \text{ et } C_{(k', k_s)} \not\subset A_f\}.$$

On examine les deux cas suivants :

- si $C_{(k', k_s)} \cap A_f \neq \emptyset$, alors il existe $x'_{k'} \in C'_{k'}$ tel que $k_s < nf(x'_{k'}) + 1$;
- si $C_{(k', k_s)} \not\subset A_f$, alors il existe $y'_{k'} \in C'_{k'}$ tel que $nf(y'_{k'}) < k_s$.

Par conséquent

$$\mathbf{Var}(Y) \leq \frac{1}{4N^2} \sum_{k'} (n |f(x'_{k'}) - f(y'_{k'})| + 2).$$

Le Lemme 2.1 donne

$$\sum_{k'} |f(x'_{k'}) - f(y'_{k'})| \leq (s-1)V(f)n^{s-2},$$

ce qui termine la preuve. $\square$

La variance de l'estimateur de Monte Carlo stratifié est d'ordre $1/N^{1+1/s}$ ce qui représente un gain en précision de facteur $1/N^{1/s}$ par rapport à l'estimateur de Monte Carlo simple. Ce gain diminue en dimension élevée, ce qui limite l'application de cette technique de stratification simple à des problèmes de dimension modérée, par exemple pour des simulations nécessitant l'évaluation d'intégrales en dimension s comprise entre 2 et 6 : voir par exemple [62, 63, 64, 67, 72, 73, 19, 18, 20], où des simulations QMC sont proposées et [59, 60, 61] pour des simulations QMC hasardisées. C'est aussi le cas des simulations détaillées aux chapitres 4 et 5. Pour des résultats optimaux en dimension plus élevée il est en général intéressant de voir si les intégrandes rencontrés peuvent suggérer une stratification partielle du domaine c'est-à-dire une partition de l'hypercube unité I^s le long de quelques coordonnées parmi les s .

Une majoration de la variance du même ordre qu'ici avait été donné dans [60]. Le cadre de cette dernière étude était différent à deux points de vue. D'abord l'analyse théorique était limitée à la dimension $s = 2$; ensuite cette analyse était faite dans le cadre de la simulation des chaînes de Markov.

2.2.3 Essais numériques

Dans ce paragraphe, nous validons numériquement les analyses faites précédemment. Nous nous limitons au calcul d'intégrales de fonctions indicatrices en dimensions 2, 3 et 4.

On considère le sous-ensemble de la boule unité s -dimensionnelle

$$Q := \{x \in I^s : \|x\|_2 < 1\},$$

où $\|x\|_2$ désigne la norme euclidienne de x . Dans cet exemple, la valeur exacte de l'intégrale

$$\mathcal{J} = \int_{I^s} \mathbf{1}_Q(x) d\lambda_s(x) = \lambda_s(Q)$$

est connue et vaut

$$\lambda_s(Q) = \frac{\pi^{s/2}}{2^s \Gamma\left(\frac{s}{2} + 1\right)},$$

ce qui permet de calculer les erreurs des estimations. On a

$$Q := \{x = (x', x_s) \in I^s : x_s < f(x')\},$$

où

$$f : x' = (x_1, \dots, x_{s-1}) \rightarrow \sqrt{1 - x_1^2 - \dots - x_{s-1}^2}.$$

Courbes d'erreur

On estime la valeur de $\mathcal{J}$ par une méthode de Monte Carlo usuelle (MC), la méthode stratifiée simple (MCS) décrite au paragraphe précédent et une méthode quasi-Monte Carlo (QMC) utilisant une suite de Faure [30]. Les résultats sont représentés sur la Figure 2.4. On remarque qu'ils sont extrêmement bruités.

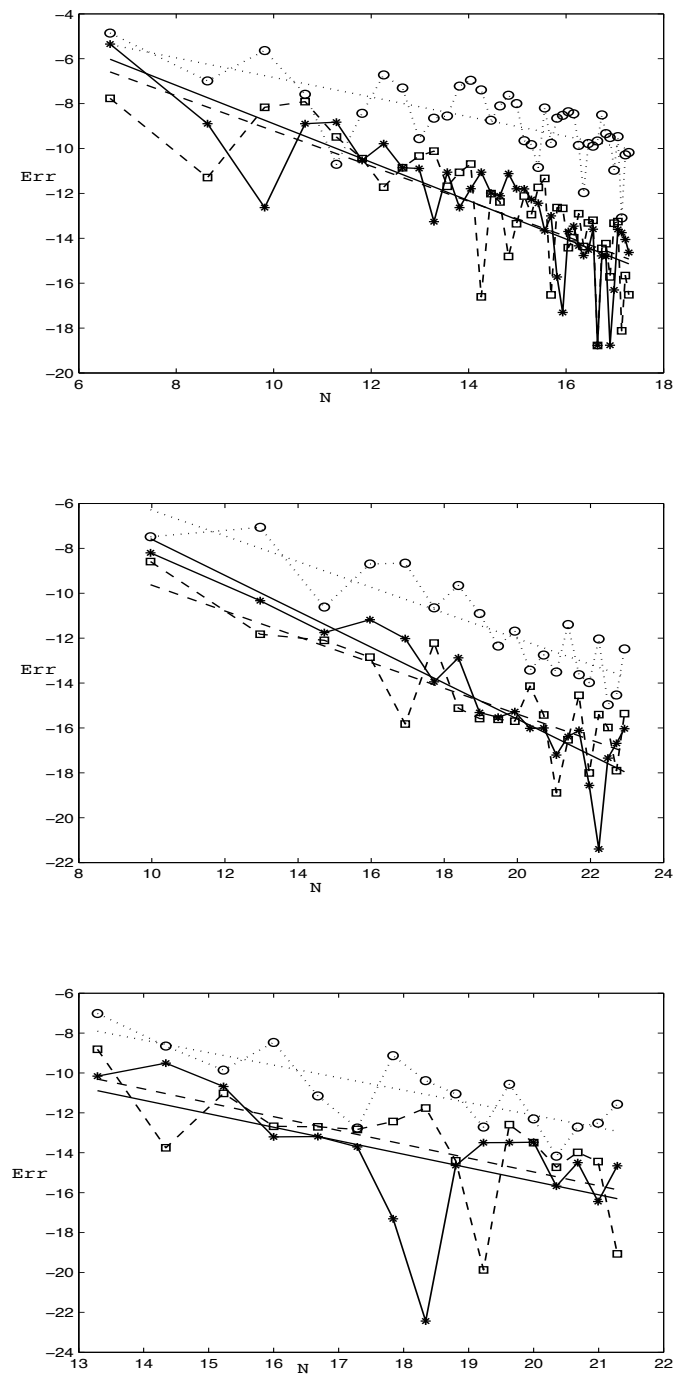


FIGURE 2.4 – Courbes des erreurs et ajustements linéaires par un calcul MC (tracés en pointillés), QMC (tracés continus) et MCS (tracés en tirets) en fonction du nombre de points N . Dimension $s = 2$ pour $N = 10^2, \dots, 400^2$ (en haut); dimension $s = 3$ pour $N = 10^3, \dots, 200^3$ (au milieu); dimension $s = 4$ pour $N = 10^4, \dots, 40^4$ (en bas). Les échelles sont logarithmiques en base 2.

TABLE 2.1 – Ordres α des erreurs dans le calcul de $\mathcal{J}$ par les méthodes MC, MCS et QMC.

Dimension s	MC	MCS	QMC
2	0,44	0,78	0,86
3	0,57	0,57	0,80
4	0,63	0,69	0,68

TABLE 2.2 – Ordres β des variances des estimateurs MC et MCS de $\mathcal{J}$.

Dimension	MC	MCS	Borne théorique
2	0,99	1,49	1,50
3	1,00	1,33	1,33
4	1,00	1,25	1,25

L'erreur de chaque méthode est la valeur absolue de la différence entre la valeur exacte et la valeur approchée. En supposant que les erreurs sont $\mathbf{Err} = \mathcal{O}(N^{-\alpha})$, on détermine les valeurs de α par ajustement linéaire en utilisant la méthode des moindres carrés (les droites sont tracées sur la Figure 2.4). Ces valeurs sont données dans la Table 2.1.

On remarque que les erreurs de la méthode stratifiée simple sont du même ordre que celles de la méthode QMC et sont plus petites que celles de la méthode de Monte Carlo usuelle.

Calcul des variances

On évalue ensuite les variances des estimateurs de $\mathcal{J}$ calculés par une méthode de Monte Carlo usuelle ou une méthode de Monte Carlo stratifiée simple. Pour un nombre N de points aléatoires utilisés, on calcule la variance empirique d'un échantillon de M observations de $\mathcal{J}$ obtenues en répétant le calcul de façon indépendante.

On a représenté les valeurs des variances des estimateurs MC et MCS en fonction du nombre de points N de la simulation sur la Figure 2.5. On a tracé les courbes des variances pour $M = 100$ et $M = 1\,000$ répétitions : on voit que la différence des résultats est assez faible.

En supposant que la variance est $\mathbf{Var} = \mathcal{O}(N^{-\beta})$, on détermine les valeurs de β en effectuant un ajustement linéaire pour $M = 1\,000$. Ces valeurs sont regroupées dans la Table 2.2. On a ajouté la borne théorique donnée par la Proposition 2.4.

Il est clair que l'estimateur de la méthode MCS est meilleur que celui de la méthode MC usuelle, puisque la variance est toujours inférieure et l'ordre β toujours supérieur. De plus, les valeurs de β obtenues dans les simulations sont très voisines des ordres théoriques établis dans les Propositions 2.4 et 2.6, ce qui montre que les bornes démontrées sont optimales (en ce qui concerne l'ordre).

Supposant que la variance s'exprime par $\mathbf{Var} = cN^{-\beta}$ (avec c constante) on voit que la

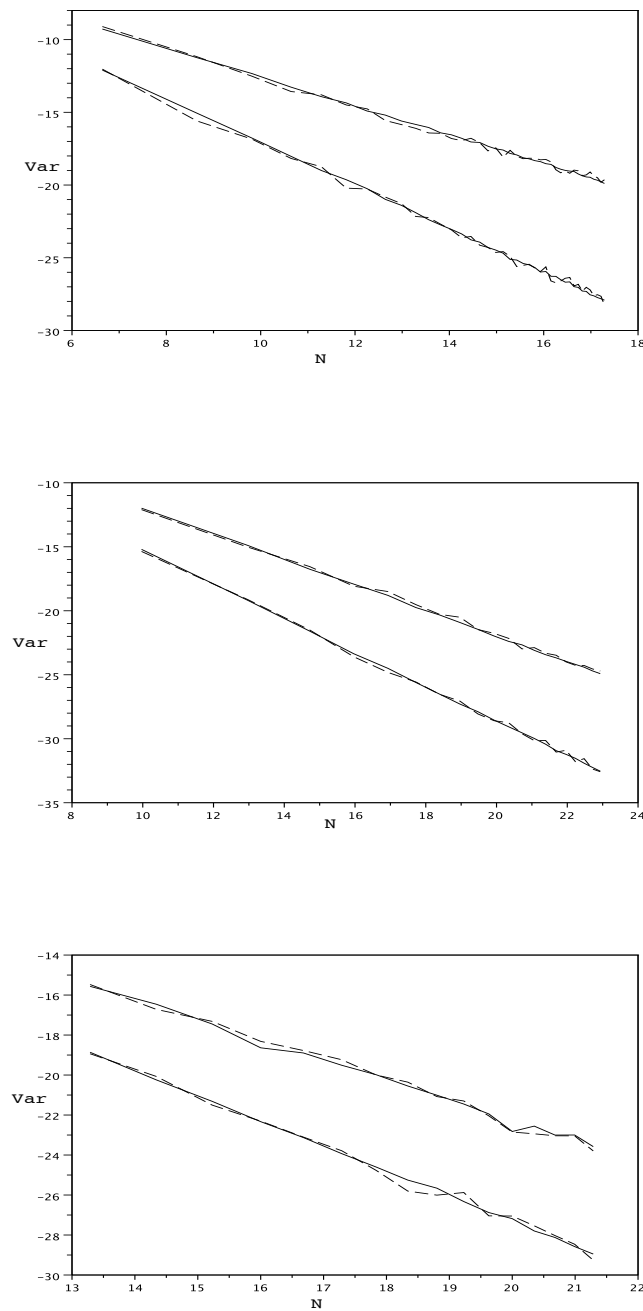


FIGURE 2.5 – Variances des estimateurs de $\mathcal{J}$ en fonction du nombre de points N , pour $M = 100$ répétitions (tracés en pointillés) et $M = 1000$ répétitions (tracés continus). Dimension $s = 2$ pour $N = 10^2, \dots, 400^2$ (en haut) ; dimension $s = 3$ pour $N = 10^3, \dots, 200^3$ (au milieu) ; dimension $s = 4$ pour $N = 10^4, \dots, 40^4$ (en bas). Les variances des estimateurs MC sont les courbes supérieures, celles des estimateurs MCS sont les courbes inférieures ; les échelles sont logarithmiques en base 2.

constante de la méthode MCS est inférieure à celle de la méthode MC, dans cet exemple.

2.3 Méthodes LHS

La méthode d'échantillonnage par hypercube latin (LHS : *Latin Hypercube Sampling*) est une méthode de stratification qui privilégie les projections uni-dimensionnelles des échantillons. Elle est souvent appliquée dans l'analyse d'incertitude.

Cette technique a été décrite dans [88] et analysée dans [121, 110]. Une grille carrée contenant des points d'un échantillon est dite un *carré latin* s'il n'y a qu'un seul point de l'échantillon dans chaque ligne et chaque colonne. Le principe d'échantillonnage par hypercube latin est une généralisation du concept précédent pour une dimension s quelconque : il y a un point unique de l'échantillon de cardinal N dans chacun des intervalles

$$I^{i-1} \times \left[\frac{\ell-1}{N}, \frac{\ell}{N} \right) \times I^{s-i}, \quad \text{pour } 1 \leq i \leq s \text{ et } 1 \leq \ell \leq N.$$

La Figure 2.6 représente un tel échantillon en dimension $s = 2$.

2.3.1 Construction d'ensembles LHS en dimension $s \geq 2$.

Soient $s \geq 2$ un entier et $N \in \mathbb{N}^*$. Une méthode d'échantillonnage LHS est la suivante :

On note N le nombre de points de l'échantillon et $\mathcal{N} = \{1, 2, \dots, N\}$ l'ensemble des indices qu'on utilisera. On note $\mathcal{S}_N$ le *groupe symétrique d'indice N* : c'est l'ensemble des permutations de $\mathcal{N}$.

1. Soient $\sigma_1, \dots, \sigma_s$ des permutations aléatoires indépendantes de l'ensemble $\mathcal{N}$, de loi uniforme sur $\mathcal{S}_N$:

$$\frac{1}{N!} \sum_{\sigma_i \in \mathcal{S}_N} \delta_{\sigma_i}$$

(δ_ω est la mesure de Dirac en ω).

2. Soient $\{(\xi_{\ell,1}, \dots, \xi_{\ell,s}) : \ell \in \mathcal{N}\}$ une famille indépendante de N variables aléatoires uniformément distribuées dans I^s .

On suppose de plus que toutes ces variables aléatoires sont indépendantes. Pour $\ell \in \mathcal{N}$, on pose

$$W_\ell = \left(\frac{\sigma_1(\ell) + \xi_{\ell,1} - 1}{N}, \frac{\sigma_2(\ell) + \xi_{\ell,2} - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\ell) + \xi_{\ell,s} - 1}{N} \right).$$

Pour $1 \leq i \leq s$ et $m_i \in \mathcal{N}$, on note

$$I_{m_i} := \left[\frac{m_i - 1}{N}, \frac{m_i}{N} \right)$$

et pour $m := (m_1, m_2, \dots, m_s) \in \mathcal{N}^s$, on note

$$I_m := I_{m_1} \times I_{m_2} \times \dots \times I_{m_s}.$$

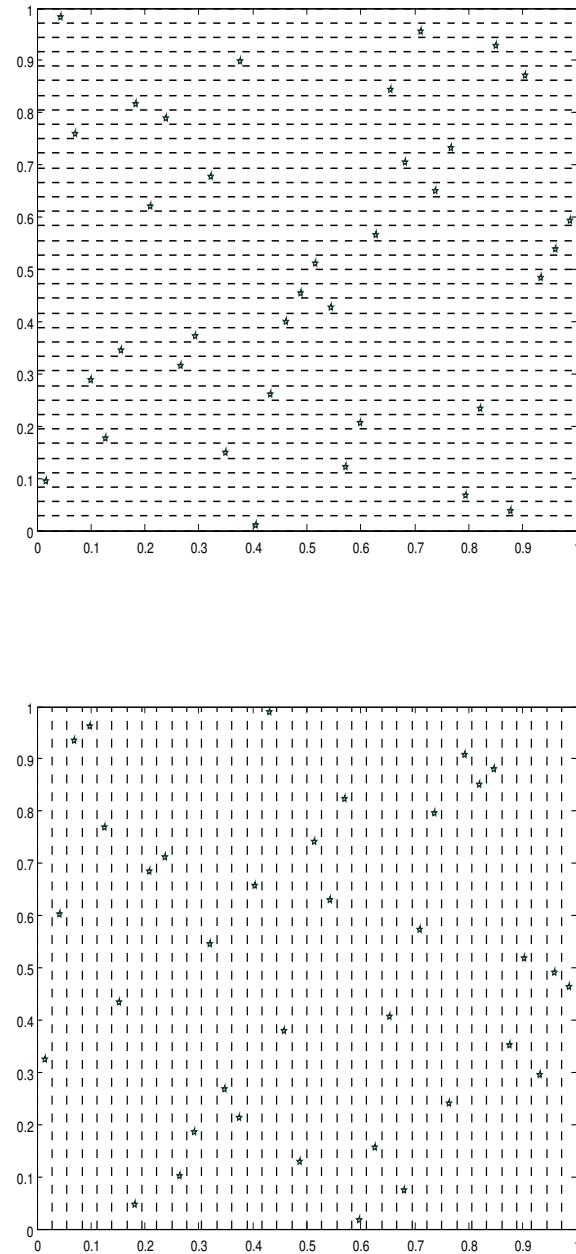


FIGURE 2.6 – Échantillon LHS de $N = 6^2$ points en dimension $s = 2$. Il y a un point unique dans chacun des rectangles de la forme $I \times [(\ell-1)/N, \ell/N)$ (en haut) ou de la forme $[(\ell-1)/N, \ell/N) \times I$ (en bas), pour $1 \leq \ell \leq N$.

Proposition 2.7 Soit $\{W_\ell : \ell \in \mathcal{N}\}$ la famille précédente.

1. Pour $1 \leq i \leq s$, soit $W_{\ell,i}$ la i -ième composante de W_ℓ . Pour tout $m \in \mathcal{N}$, il existe un seul $\ell \in \mathcal{N}$ tel que

$$W_{\ell,i} \in \left[\frac{m-1}{N}, \frac{m}{N} \right).$$

2. La variable W_ℓ est de loi uniforme sur I^s .

Preuve. (1) On a

$$W_{\ell,i} = \frac{\sigma_i(\ell) + \xi_{\ell,i} - 1}{N}.$$

Alors, pour $1 \leq m \leq N$,

$$\begin{aligned} W_{\ell,i} \in \left[\frac{m-1}{N}, \frac{m}{N} \right) &\Leftrightarrow \frac{\sigma_i(\ell) + \xi_{\ell,i} - 1}{N} \in \left[\frac{m-1}{N}, \frac{m}{N} \right) \\ &\Leftrightarrow \frac{m-1}{N} \leq \frac{\sigma_i(\ell) + \xi_{\ell,i} - 1}{N} < \frac{m}{N} \\ &\Leftrightarrow m-1 \leq \sigma_i(\ell) + \xi_{\ell,i} - 1 < m \Leftrightarrow m \leq \sigma_i(\ell) + \xi_{\ell,i} < m+1 \\ &\Leftrightarrow \sigma_i(\ell) = m, \end{aligned}$$

car $0 \leq \xi_{\ell,i} < 1$. Donc

$$W_{\ell,i} \in \left[\frac{m-1}{N}, \frac{m}{N} \right) \Leftrightarrow \ell = \sigma_i^{-1}(m).$$

D'où le premier résultat.

- (2) Soit $A \subset I^s$ un ensemble borélien. On a

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\{W_\ell \in A\}) &= \int_{\Omega} \mathbf{1}_{\{\omega : W_\ell(\omega) \in A\}}(\omega) d\mathbf{P}(\omega) \\ &= \int_{\Omega} \mathbf{1}_{\left\{ \omega : \left(\frac{\sigma_1(\omega)(\ell) + \xi_{\ell,1}(\omega) - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\omega)(\ell) + \xi_{\ell,s}(\omega) - 1}{N} \right) \in A \right\}}(\omega) d\mathbf{P}(\omega) \\ &= \frac{1}{(N!)^s} \sum_{\sigma_1 \in \mathcal{S}_N} \cdots \sum_{\sigma_s \in \mathcal{S}_N} \\ &\quad \int_{I^s} \mathbf{1}_{\left\{ (u_1, \dots, u_s) : \left(\frac{\sigma_1(\ell) + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\ell) + u_s - 1}{N} \right) \in A \right\}}(u) du \\ &= \frac{1}{(N!)^s} \sum_{m_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s \in \mathcal{N}} \sum_{\substack{\sigma_1 \in \mathcal{S}_N \\ \sigma_1(\ell) = m_1}} \cdots \sum_{\substack{\sigma_s \in \mathcal{S}_N \\ \sigma_s(\ell) = m_s}} \\ &\quad \int_{I^s} \mathbf{1}_{\left\{ (u_1, \dots, u_s) : \left(\frac{m_1 + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m_s + u_s - 1}{N} \right) \in A \right\}}(u) du \\ &= \frac{1}{N^s} \sum_{m_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s \in \mathcal{N}} \int_{I^s} \mathbf{1}_{\left\{ (u_1, \dots, u_s) : \left(\frac{m_1 + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m_s + u_s - 1}{N} \right) \in A \right\}}(u) du, \end{aligned}$$

car

$$\#\{\sigma_i \in \mathcal{S}_N : \sigma_i(\ell) = m_i\} = (N-1)!$$

En faisant les changement de variables :

$$v_i := \frac{m_i + u_i - 1}{N}, \quad 1 \leq i \leq s,$$

on obtient

$$\mathbf{P}(\{W_\ell \in A\}) = \frac{1}{N^s} \sum_{m_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s \in \mathcal{N}} N^s \int_{I_m} \mathbf{1}_A(v) dv = \int_{I^s} \mathbf{1}_A(v) dv,$$

ce qui prouve le second résultat. $\square$

Soit $f : I^s \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction mesurable de carré intégrable. On veut estimer

$$\mathcal{J} = \int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x)$$

par la méthode LHS.

Proposition 2.8 *L'estimateur LHS*

$$Z = \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{N}} f \circ W_\ell$$

est un estimateur sans biais de $\mathcal{J}$.

Preuve. Pour $\ell \in \mathcal{N}$, on a

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[f \circ W_\ell] &= \int_{\Omega} f\left(\frac{\sigma_1(\omega)(\ell) + \xi_{\ell,1}(\omega) - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\omega)(\ell) + \xi_{\ell,s}(\omega) - 1}{N}\right) d\mathbf{P}(\omega) \\ &= \frac{1}{(N!)^s} \sum_{\sigma_1 \in \mathcal{S}_N} \cdots \sum_{\sigma_s \in \mathcal{S}_N} \int_{I^s} f\left(\frac{\sigma_1(\ell) + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\ell) + u_s - 1}{N}\right) du \\ &= \frac{1}{(N!)^s} \sum_{m_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s \in \mathcal{N}} \sum_{\substack{\sigma_1 \in \mathcal{S}_N \\ \sigma_1(\ell) = m_1}} \cdots \sum_{\substack{\sigma_s \in \mathcal{S}_N \\ \sigma_s(\ell) = m_s}} \\ &\quad \int_{I^s} f\left(\frac{m_1 + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m_s + u_s - 1}{N}\right) du \\ &= \frac{1}{N^s} \sum_{m_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s \in \mathcal{N}} \int_{I^s} f\left(\frac{m_1 + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m_s + u_s - 1}{N}\right) du. \end{aligned}$$

car

$$\#\{\sigma_i \in \mathcal{S}_N : \sigma_i(\ell) = m_i\} = (N-1)!$$

En faisant les changements de variables :

$$v_i := \frac{m_i + u_i - 1}{N},$$

on obtient

$$\mathbf{E}[f \circ W_\ell] = \sum_{m_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s \in \mathcal{N}} \int_{I_m} f(u) du = \int_{I^s} f(u) du = \mathcal{J}.$$

L'espérance de Z s'écrit

$$\mathbf{E}[Z] = \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{N}} \mathbf{E}[f \circ W_\ell] = \mathcal{J},$$

donc Z est un estimateur sans biais de $\mathcal{J}$. $\square$

2.3.2 Variance de l'estimateur LHS

McKay, Beckman et Conover ont introduit dans [88] l'échantillonnage LHS comme une variante de l'échantillonnage stratifié. Ils ont prouvé le résultat suivant.

Proposition 2.9 *Si f est monotone par rapport à chacune de ses variables, alors*

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \mathbf{Var}(X).$$

Stein a montré dans [121] que la variance de l'estimateur LHS est asymptotiquement ($N \rightarrow \infty$) inférieure à la variance de l'estimateur MC simple.

Proposition 2.10 *Si f est de carré intégrable, alors*

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \mathbf{Var}(X) + o\left(\frac{1}{N}\right).$$

Une proposition d'Owen [110] prouve que la variance d'un échantillon LHS à N points ne peut jamais être supérieure à la variance d'un échantillon MC simple à $N - 1$ points.

Proposition 2.11 *Si f est de carré intégrable, alors*

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \frac{\sigma^2(f)}{N-1} = \frac{N}{N-1} \mathbf{Var}(X).$$

Nous allons ici améliorer la majoration de la variance de l'estimateur LHS, dans le cas simple où $f = \mathbf{1}_A$ (la différence est négligeable quand N est grand). On supposera $N \geq 2$.

Proposition 2.12 *Si $A \subset I^s$ est un ensemble borélien, la variance de l'estimateur LHS*

$$Z = \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{N}} \mathbf{1}_A \circ W_\ell$$

vérifie

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \frac{1}{N} \left(\frac{1}{4} + s \frac{N-1}{N} \right).$$

Preuve. On a

$$\mathbf{Var}(Z) = \frac{1}{N^2} \sum_{\ell \in \mathcal{N}} \mathbf{Var}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell) + \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{N} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell, \mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}).$$

On commence par le premier terme (les variances). On a

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell) &= \mathbf{E}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)^2] - (\mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_\ell])^2 = \mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_\ell] - (\mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_\ell])^2 \\ &= \lambda_s(A) - (\lambda_s(A))^2 = \lambda_s(A)(1 - \lambda_s(A)) \leq \frac{1}{4}, \end{aligned}$$

en remarquant que $0 \leq \lambda_s(A) \leq 1$ et que la fonction $x \in [0, 1] \rightarrow x(1 - x)$ atteint son maximum de $1/4$ en $1/2$.

On passe alors à la majoration du deuxième terme (les covariances). Soient $\ell, \ell' \in \mathcal{L}$ tels que $\ell \neq \ell'$.

$$\mathbf{Cov}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell, \mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}) = \mathbf{E}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)(\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'})] - \mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_\ell] \mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}].$$

On a

$$\mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_\ell] = \mathbf{E}[\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}] = \lambda_s(A).$$

D'un autre côté

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)(\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'})] &= \int_{\Omega} \mathbf{1}_A \left(\frac{\sigma_1(\omega)(\ell) + \xi_{\ell,1}(\omega) - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\omega)(\ell) + \xi_{\ell,s}(\omega) - 1}{N} \right) \\ &\quad \mathbf{1}_A \left(\frac{\sigma_1(\omega)(\ell') + \xi_{\ell',1}(\omega) - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\omega)(\ell') + \xi_{\ell',s}(\omega) - 1}{N} \right) d\mathbf{P}(\omega) \\ &= \frac{1}{(N!)^s} \sum_{\sigma_1 \in \mathcal{S}_N} \dots \sum_{\sigma_s \in \mathcal{S}_N} \\ &\quad \int_{I^{2s}} \mathbf{1}_A \left(\frac{\sigma_1(\ell) + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\ell) + u_s - 1}{N} \right) \\ &\quad \mathbf{1}_A \left(\frac{\sigma_1(\ell') + u'_1 - 1}{N}, \dots, \frac{\sigma_s(\ell') + u'_s - 1}{N} \right) du du' \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)(\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'})] &= \frac{1}{(N!)^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \dots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \sum_{\substack{\sigma_1 \in \mathcal{S}_N \\ \sigma_1(\ell) = m_1, \\ \sigma_1(\ell') = m'_1}} \dots \sum_{\substack{\sigma_s \in \mathcal{S}_N \\ \sigma_s(\ell) = m_s, \\ \sigma_s(\ell') = m'_s}} \\ &\quad \int_{I^s} \mathbf{1}_A \left(\frac{m_1 + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m_s + u_s - 1}{N} \right) du \\ &\quad \int_{I^s} \mathbf{1}_A \left(\frac{m'_1 + u'_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m'_s + u'_s - 1}{N} \right) du' \\ &= \frac{1}{(N(N-1))^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \dots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \\ &\quad \int_{I^s} \mathbf{1}_A \left(\frac{m_1 + u_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m_s + u_s - 1}{N} \right) du \\ &\quad \int_{I^s} \mathbf{1}_A \left(\frac{m'_1 + u'_1 - 1}{N}, \dots, \frac{m'_s + u'_s - 1}{N} \right), du' \end{aligned}$$

car, si $m_i, m'_i \in \mathcal{N}$ avec $m_i \neq m'_i$,

$$\#\{\sigma_i \in \mathcal{S}_N : \sigma_i(\ell) = m_i \text{ et } \sigma_i(\ell') = m'_i\} = (N-2)!$$

En faisant les changements de variables :

$$v_i := \frac{m_i + u_i - 1}{N}, \quad v'_i := \frac{m_i + u'_i - 1}{N}$$

on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)(\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'})] &= \frac{N^{2s}}{(N(N-1))^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \int_{I_m} \mathbf{1}_A(v) dv \int_{I_{m'}} \mathbf{1}_A(v') dv' \\ &= \frac{N^s}{(N-1)^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}). \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)(\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'})] &= \frac{N^s}{(N-1)^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}) \\ &\quad - (\lambda_s(A))^2 \\ &= \frac{N^s}{(N-1)^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}) \\ &\quad - \sum_{m_1, m'_1 \in \mathcal{N}} \cdots \sum_{m_s, m'_s \in \mathcal{N}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}). \end{aligned}$$

On en déduit

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}[(\mathbf{1}_A \circ W_\ell)(\mathbf{1}_A \circ W_{\ell'})] &\leq \frac{N^s}{(N-1)^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}) \\ &\quad - \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}) \\ &\leq \left(\frac{N^s}{(N-1)^s} - 1 \right) N^s (N-1)^s \frac{1}{N^{2s}} \leq 1 - \left(\frac{N-1}{N} \right)^s \\ &\leq \frac{s}{N}. \end{aligned}$$

D'où

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \frac{1}{N^2} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \frac{1}{4} + \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell \neq \ell'}} \frac{s}{N} \leq \frac{1}{4N} + \frac{s(N-1)}{N^2},$$

qui est le résultat. $\square$

Si A est un rectangle à côtés parallèles aux axes de coordonnées, on a un résultat de réduction de variance par rapport à la méthode de Monte Carlo. On a vu que si X est l'estimateur de Monte Carlo usuel de $\mathcal{J}$, on a

$$\mathbf{Var}(X) = \frac{1}{N} \lambda_s(A) (1 - \lambda_s(A)).$$

Ici encore l'amélioration par rapport à la proposition 2.11 est minime. On supposera dans la suite $N \geq 3$.

Proposition 2.13 *Si A est un rectangle de I^s , à côtés parallèles aux axes de coordonnées, la variance de l'estimateur LHS*

$$Z = \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{N}} \mathbf{1}_A \circ W_\ell$$

vérifie

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \frac{1}{N} \lambda_s(A) (1 - \lambda_s(A)).$$

Preuve. D'après la démonstration de la proposition précédente, on a

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(Z) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\ell \in \mathcal{N}} \mathbf{Var}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell) + \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{N} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell, \mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}) \\ &= \frac{1}{N} \lambda_s(A) (1 - \lambda_s(A)) + \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{N} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell, \mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}). \end{aligned}$$

Il suffit donc de démontrer

$$\forall \ell, \ell' \in \mathcal{N} \quad \ell \neq \ell' \quad \mathbf{Cov}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell, \mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}) \leq 0.$$

On a vu

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}(\mathbf{1}_A \circ W_\ell, \mathbf{1}_A \circ W_{\ell'}) &= \frac{N^s}{(N-1)^s} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}) \\ &\quad - (\lambda_s(A))^2. \end{aligned}$$

Soit

$$A := \prod_{i=1}^s A_i,$$

où A_i est un intervalle d'extrémités

$$\frac{m_i - x_i^{-1} - 1}{N} \quad \text{et} \quad \frac{m_i + n_i + x_i^{+1} - 1}{N},$$

avec

$$m_i, n_i \in \mathcal{N} \quad x_i^{-1}, x_i^{+1} \in [0, 1).$$

On a alors

$$\lambda_s(A) = \frac{1}{N^s} \prod_{i=1}^s (n_i + x_i^{-1} + x_i^{+1}).$$

On note $[1, s] := \{1, 2, \dots, s\}$ et, pour $J \subset [1, s]$, on note $J^c := [1, s] \setminus J$. Alors

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{m_1, m'_1 \in \mathcal{N} \\ m_1 \neq m'_1}} \cdots \sum_{\substack{m_s, m'_s \in \mathcal{N} \\ m_s \neq m'_s}} \lambda_s(A \cap I_m) \lambda_s(A \cap I_{m'}) &= \\ \frac{1}{N^{2s}} \sum_{J \subset [1, s]} \sum_{\epsilon_k = \pm 1, k \in J^c} \prod_{j \in J} n_j \prod_{j \in J} (n_j + x_j^{-1} + x_j^{+1} - 1) &\prod_{k \in J^c} x_k^{\epsilon_k} \prod_{k \in J^c} (n_k + x_k^{-\epsilon_k}). \end{aligned}$$

On montre par récurrence sur s

$$\sum_{J \subset [1, s]} \sum_{\epsilon_k = \pm 1, k \in J^c} \prod_{j \in J} n_j \prod_{j \in J} (n_j + x_j^{-1} + x_j^{+1} - 1) \prod_{k \in J^c} x_k^{\epsilon_k} \prod_{k \in J^c} (n_k + x_k^{-\epsilon_k}) = \prod_{i=1}^s (n_i(n_i + x_i^{-1} + x_i^{+1} - 1) + (n_i + x_i^{-1})x_i^{+1} + (n_i + x_i^{+1})x_i^{-1}).$$

Il suffit alors de démontrer

$$\frac{N^s}{(N-1)^s} \prod_{i=1}^s (n_i(n_i + x_i^{-1} + x_i^{+1} - 1) + (n_i + x_i^{-1})x_i^{+1} + (n_i + x_i^{+1})x_i^{-1}) \leq \left(\prod_{i=1}^s (n_i + x_i^{-1} + x_i^{+1}) \right)^2.$$

Soit, pour tous les $n \in \mathcal{N}$ et $x^{-1}, x^{+1} \in [0, 1)$:

$$\frac{N}{N-1} (n(n + x^{-1} + x^{+1} - 1) + (n + x^{-1})x^{+1} + (n + x^{+1})x^{-1}) \leq (n + x^{-1} + x^{+1})^2.$$

On réduit le polynôme quadratique :

$$\begin{aligned} P_{N,n}(x^{-1}, x^{+1}) &:= (N-1)(n + x^{-1} + x^{+1})^2 \\ &\quad - N(n(n + x^{-1} + x^{+1} - 1) + (n + x^{-1})x^{+1} + (n + x^{+1})x^{-1}) \\ &= N(n + (x^{-1})^2 + (x^{+1})^2) - (n + x^{-1} + x^{+1})^2 \\ &= \frac{1}{2}(N-2) \left(x^{-1} + x^{+1} - \frac{2n}{N-2} \right)^2 + \frac{N}{2}(x^{-1} - x^{+1})^2 + \frac{nN(N-2-n)}{N-2}. \end{aligned}$$

- Si $x^{-1} = x^{+1} = 0$, on a, pour $1 \leq n \leq N$:

$$P_{N,n}(0, 0) = n(N-n) \geq 0.$$

- Si $x^{-1} = 0, x^{+1} \in (0, 1)$, alors $1 \leq n \leq N-1$ et l'on a :

$$P_{N,n}(0, x^{+1}) = (N-1) \left(x^{+1} - \frac{n}{N-1} \right)^2 + \frac{nN(N-1-n)}{N-1} \geq 0.$$

- Si $x^{-1} \in (0, 1), x^{+1} = 0$, alors $1 \leq n \leq N-1$ et l'on a de manière analogue :

$$P_{N,n}(x^{-1}, 0) = (N-1) \left(x^{-1} - \frac{n}{N-1} \right)^2 + \frac{nN(N-1-n)}{N-1} \geq 0.$$

- Si $x^{-1}, x^{+1} \in (0, 1)$, alors $1 \leq n \leq N-2$ et l'on a d'après ce qui précède :

$$\begin{aligned} P_{N,n}(x^{-1}, 0) &= \frac{1}{2}(N-2) \left(x^{-1} + x^{+1} - \frac{2n}{N-2} \right)^2 + \frac{N}{2}(x^{-1} - x^{+1})^2 \\ &\quad + \frac{nN(N-2-n)}{N-2} \geq 0. \end{aligned}$$

TABLE 2.3 – Ordres γ des variances des estimateurs MC et LHS de $\mathcal{J}$.

Dimension	MC	LHS
2	0,99	1,00
3	1,00	1,00
4	1,01	1,00

Ce qui donne le résultat. $\square$

La méthode des *tableaux orthogonaux* (*orthogonal arrays*) permet de généraliser l'échantillonnage LHS. Au lieu de rechercher une stratification sur les projections en dimension 1, on vise une stratification sur les projections en dimension $\leq r$ (avec $r \leq s$). Cette approche a été initiée par Tang [122] et Owen [107, 108]. L'analyse d'Owen de [110] indique une variance du même ordre que celle de la méthode LHS (et aussi du schéma de Monte Carlo usuel).

2.3.3 Essais numériques

Dans ce paragraphe, nous voulons vérifier les analyses précédentes. Comme pour la méthode MC stratifiée simple, nous nous limitons au calcul d'intégrales de fonctions indicatrices en dimensions 2, 3 et 4 et nous considérons le même sous-ensemble de la boule unité s -dimensionnelle :

$$Q := \{x \in I^s : \|x\|_2 < 1\}.$$

On évalue les variances des estimateurs de $\mathcal{J} = \lambda_s(Q)$ calculés par une méthode de Monte Carlo usuelle ou la méthode LHS. Pour un nombre N de points aléatoires utilisés, on calcule la variance empirique d'un échantillon de M observations de $\mathcal{J}$ obtenues en répétant le calcul de façon indépendante.

On a représenté les valeurs des variances des estimateurs MC et LHS en fonction du nombre de points N de la simulation sur la Figure 2.7. On a tracé les courbes des variances pour $M = 100$ et $M = 1\,000$ répétitions : on voit que la différence des résultats est assez faible.

En supposant que la variance est de l'ordre de $N^{-\gamma}$, on détermine les valeurs de γ en effectuant un ajustement linéaire pour $M = 1\,000$. Ces valeurs sont regroupées dans la Table 2.3.

L'estimateur de la méthode LHS est meilleur que celui de la méthode MC simple, puisque la variance est toujours inférieure. Par contre, l'ordre γ est le même.

Supposant que la variance s'exprime par $\mathbf{Var} = cN^{-\gamma}$ (avec c constante) on voit que la constante de la méthode LHS est inférieure à celle de la méthode MC, dans cet exemple.

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons d'abord présenté et analysé une méthode de Monte Carlo stratifiée consistant à utiliser une partition de l'hypercube unité en N sous-domaines

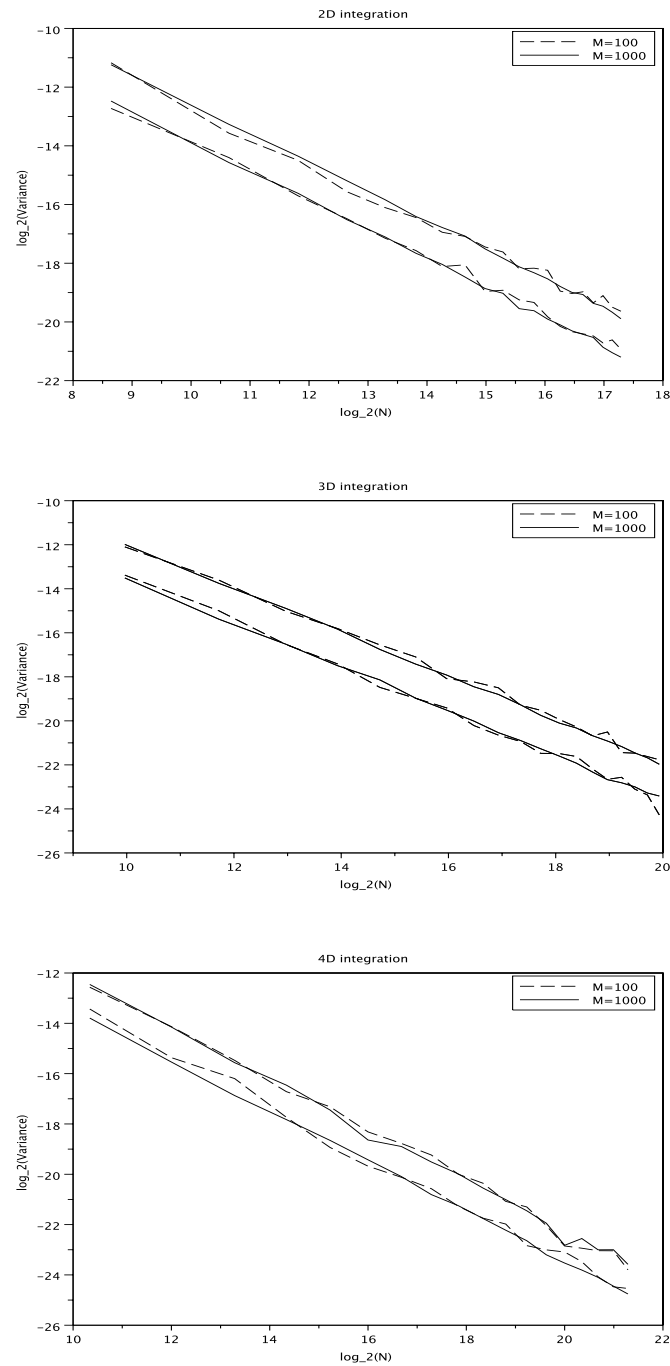


FIGURE 2.7 – Courbes des variances des estimateurs de $\mathcal{J}$ en fonction du nombre de points N pour $M = 100$ répétitions (tracés en pointillés) et $M = 1\,000$ répétitions (tracés continus). Dimension $s = 2$ pour $20^2 \leq N \leq 400^2$ (en haut); dimension $s = 3$ pour $10^3 \leq N \leq 100^3$ (au milieu); dimension $s = 4$ pour $6^4 \leq N \leq 40^4$ (en bas). Les variances des estimateurs MC sont les courbes supérieures, celles des estimateurs LHS sont les courbes inférieures; les échelles sont logarithmiques en base 2.

cubiques identiques et à engendrer N variables aléatoires indépendantes, chacune étant uniformément distribuée dans un des sous-domaines. Ensuite, nous avons présenté la méthode LHS, pour laquelle les projections 1-D des N variables aléatoires sont uniformément distribuées dans les N intervalles de même longueur qui découpent l'intervalle unité.

L'ordre de la variance de l'estimateur MCS a été établi pour le cas des intégrales de fonctions indicatrices et a montré un gain par rapport à la simulation de Monte Carlo usuelle. Les résultats de quelques essais numériques ont confirmé cette analyse. Par contre, pour les mêmes intégrales de fonctions indicatrices, l'ordre de la méthode LHS semble le même que celui de la méthode de Monte Carlo usuelle. Dans le chapitre suivant une comparaison est faite entre ces trois types d'échantillonnage MC, MCS et LHS et une nouvelle technique qui mélange les approches MCS et LHS est détaillée.

Chapitre 3

Méthode de Monte Carlo stratifiée Sudoku pour l'intégration numérique

3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous étudions une méthode d'échantillonnage stratifiée appelée “*Sudoku*”, qui sera utilisée pour la résolution numérique des équations de diffusion et coagulation : voir les chapitres 4 et 5. Cette méthode est intermédiaire entre la méthode de stratification simple (MCS) et la méthode LHS analysées dans le chapitre précédent. Elle possède à la fois les propriétés de stratification multi-dimensionnelle de la méthode MCS et les propriétés de stratification uni-dimensionnelle des méthodes LHS. Nous considérons d'abord le problème de l'intégration numérique des fonctions indicatrices et nous démontrons une borne de la variance de l'estimateur. Dans la situation analysée, les variables aléatoires ne sont pas indépendantes, ce qui rend les calculs plus laborieux que dans le chapitre précédent. L'étude théorique est complétée par des essais numériques. Une partie des résultats de ce chapitre a été publiée dans [24].

3.2 Stratification Sudoku

Soit $s \geq 1$ un entier, $f : I^s \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction mesurable et λ_s la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{R}^s$. On veut approcher

$$\mathcal{J} := \int_{I^s} f(x) d\lambda_s(x)$$

par une méthode de Monte Carlo stratifiée. On commence par construire l'ensemble de points aléatoires qui est utilisé dans l'approximation.

Soit

1. $n \in \mathbb{N}^*$ un entier, $N = n^s$,

$$\mathcal{L} = \{\ell = (\ell_1, \dots, \ell_s) : \ell_1, \dots, \ell_s \in \{1, \dots, n\}\}$$

et

$$\mathcal{M} = \{m = (m_1, \dots, m_s) : m_1, \dots, m_s \in \{1, \dots, n^{s-1}\}\};$$

2. $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(s)}$ des variables aléatoires uniformément distribuées sur I^N ;
3. $\sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(s)}$ des bijections aléatoires de $\{1, \dots, n\}^{s-1}$ dans $\{1, \dots, n^{s-1}\}$, de loi uniforme sur l'ensemble $\mathcal{S}$ de toutes ces bijections.

On suppose que toutes les variables aléatoires définies dans (2) et (3) sont indépendantes.

Pour un vecteur $x = (x_1, \dots, x_s)$, on note $\hat{x}_i := (x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_s)$. On pose pour tout $\ell \in \mathcal{L}$:

$$W_\ell = (W_{\ell,1}, \dots, W_{\ell,s}) \quad \text{avec} \quad W_{\ell,i} := \frac{\ell_i - 1}{n} + \frac{\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1}{N} + \frac{\xi_\ell^{(i)}}{N}. \quad (3.2.1)$$

L'ensemble $\{W_\ell : \ell \in \mathcal{L}\}$ est appelé *ensemble stratifié Sudoku*.

Proposition 3.1 *L'ensemble de points défini dans (3.2.1) vérifie les propriétés suivantes.*

1. Dans tout hypercube de la forme

$$\prod_{i=1}^s \left[\frac{\ell'_i - 1}{n}, \frac{\ell'_i}{n} \right), \quad 1 \leq \ell'_1 \leq n, \dots, 1 \leq \ell'_s \leq n$$

il n'y a qu'un seul point.

2. Dans tout hyper-rectangle de la forme

$$[0, 1)^{i-1} \times \left[\frac{k-1}{n^s}, \frac{k}{n^s} \right) \times [0, 1)^{s-i}, \quad 1 \leq i \leq s, \quad 1 \leq k \leq n^s$$

il n'y a qu'un seul point.

Preuve.

1. Soient $1 \leq \ell'_1 \leq n, \dots, 1 \leq \ell'_s \leq n$. On a les équivalences

$$\begin{aligned} W_\ell \in \prod_{i=1}^s \left[\frac{\ell'_i - 1}{n}, \frac{\ell'_i}{n} \right) &\Leftrightarrow \forall i \quad W_{\ell,i} \in \left[\frac{\ell'_i - 1}{n}, \frac{\ell'_i}{n} \right) \\ &\Leftrightarrow \forall i \quad \frac{\ell'_i - 1}{n} \leq \frac{\ell_i - 1}{n} + \frac{\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1}{n^s} + \frac{\xi_\ell^{(i)}}{n^s} < \frac{\ell'_i}{n} \\ &\Leftrightarrow \forall i \quad \ell'_i - 1 \leq \ell_i - 1 + \frac{\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1}{n^{s-1}} + \frac{\xi_\ell^{(i)}}{n^{s-1}} < \ell'_i \\ &\Leftrightarrow \forall i \quad \ell'_i \leq \ell_i + \frac{\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1}{n^{s-1}} + \frac{\xi_\ell^{(i)}}{n^{s-1}} < \ell'_i + 1. \end{aligned}$$

Or

$$0 \leq \frac{\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1}{n^{s-1}} + \frac{\xi_\ell^{(i)}}{n^{s-1}} < \frac{n^{s-1} - 1}{n^{s-1}} + \frac{1}{n^{s-1}} = 1.$$

Par conséquent,

$$W_\ell \in \prod_{i=1}^s \left[\frac{\ell'_i - 1}{n}, \frac{\ell'_i}{n} \right) \Leftrightarrow \forall i \quad \ell_i = \ell'_i.$$

Ce qui prouve que dans chaque hypercube on a un point unique.

2. Soit $1 \leq i \leq s$, $1 \leq k \leq n^s$. On a les équivalences

$$\begin{aligned}
 W_\ell \in I^{i-1} \times \left[\frac{k-1}{n^s}, \frac{k}{n^s} \right) \times I^{s-i} &\Leftrightarrow W_{\ell,i} \in \left[\frac{k-1}{n^s}, \frac{k}{n^s} \right) \\
 &\Leftrightarrow \frac{k-1}{n^s} \leq \frac{\ell_i-1}{n} + \frac{\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i)-1}{n^s} + \frac{\xi_\ell^{(i)}}{n^s} < \frac{k}{n^s} \\
 &\Leftrightarrow k-1 \leq (\ell_i-1)n^{s-1} + \sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i)-1 + \xi_\ell^{(i)} < k \\
 &\Leftrightarrow k \leq (\ell_i-1)n^{s-1} + \sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) + \xi_\ell^{(i)} < k+1.
 \end{aligned}$$

Puisque $0 \leq \xi_\ell^{(i)} < 1$, on a

$$\begin{aligned}
 W_\ell \in I^{i-1} \times \left[\frac{k-1}{n^s}, \frac{k}{n^s} \right) \times I^{s-i} &\Leftrightarrow k = (\ell_i-1)n^{s-1} + \sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) \\
 &\Leftrightarrow k-1 = (\ell_i-1)n^{s-1} + \sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1.
 \end{aligned}$$

Comme

$$1 \leq \sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) \leq n^{s-1} \quad \text{donc} \quad 0 \leq \sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1 < n^{s-1}$$

et $\ell_i - 1$ est le quotient de la division euclidienne de $k - 1$ par n^{s-1} . Comme

$$1 \leq k \leq n^s \quad \text{donc} \quad 0 \leq k - 1 < n^s$$

on a

$$0 \leq \ell_i - 1 < n \quad \text{donc} \quad 1 \leq \ell_i \leq n.$$

Par ailleurs $\sigma^{(i)}(\hat{\ell}_i) - 1$ est le reste de la division de $k - 1$ par n^{s-1} . Cela détermine $\hat{\ell}_i$. Ainsi il y a un point unique dans tout hyper-rectangle.

D'où le résultat. $\square$

Cette construction de points est une combinaison des méthodes de Monte-Carlo stratifiée simple (MCS) et d'échantillonnage par hypercube latin (LHS) définies au chapitre précédent. Un exemple d'un ensemble stratifié Sudoku en dimension $s = 2$, formé de 16 points est représenté sur la Figure 3.1. Si $n = 4$, il y a un point unique dans chacun des carrés de la forme :

$$\left[\frac{\ell'_1-1}{n}, \frac{\ell'_1}{n} \right) \times \left[\frac{\ell'_2-1}{n}, \frac{\ell'_2}{n} \right), \quad 1 \leq \ell'_1 \leq n, 1 \leq \ell'_2 \leq n$$

(en haut), dans chacun des rectangles de la forme :

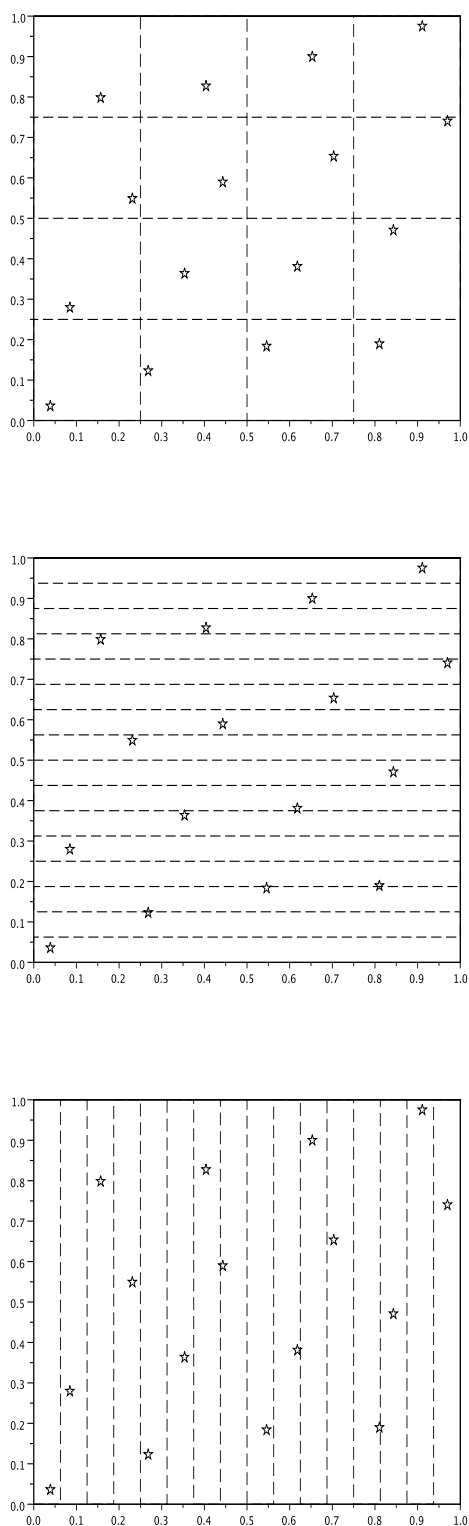
$$[0, 1) \times \left[\frac{k-1}{n^2}, \frac{k}{n^2} \right), \quad 1 \leq k \leq n^2$$

(au milieu) et dans chacun des rectangles de la forme :

$$\left[\frac{k-1}{n^2}, \frac{k}{n^2} \right) \times [0, 1), \quad 1 \leq k \leq n^2$$

(en bas). Si $n^2 = b^\mu$ (avec b, μ des entiers), cet ensemble a certaines propriétés des réseaux $(0, \mu, 2)$ en base b [96, 98].

On note dans la suite :

FIGURE 3.1 – Un exemple de 4^2 points stratifiés Sudoku en dimension $s = 2$.

- pour $\ell \in \mathcal{L}$ et $m \in \mathcal{M}$,

$$I_{\ell,m} := \prod_{i=1}^s \left[\frac{\ell_i - 1}{n} + \frac{m_i - 1}{n^s}, \frac{\ell_i - 1}{n} + \frac{m_i}{n^s} \right);$$

- pour $\ell \in \mathcal{L}$,

$$I_\ell := \bigcup_{m \in \mathcal{M}} I_{\ell,m} = \prod_{i=1}^s \left[\frac{\ell_i - 1}{n}, \frac{\ell_i}{n} \right).$$

L'estimateur stratifié Sudoku de $\mathcal{J}$ est défini par

$$Z := \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} f \circ W_\ell.$$

Proposition 3.2 *L'estimateur stratifié Sudoku Z est un estimateur sans biais de $\mathcal{J}$.*

Preuve. Pour $\ell \in \mathcal{L}$, on a

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[f \circ W_\ell] &= \int_{\Omega} f \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma^{(1)}(\omega)(\hat{\ell}_1) - 1 + \xi_\ell^{(1)}(\omega)}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{\sigma^{(s)}(\omega)(\hat{\ell}_s) - 1 + \xi_\ell^{(s)}(\omega)}{n^s} \right) d\mathbf{P}(\omega) \\ &= \frac{1}{(n^{s-1}!)^s} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_s \in \mathcal{S}} \int_{I^s} f \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma_1(\hat{\ell}_1) - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{\sigma_s(\hat{\ell}_s) - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s} \right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\ &= \frac{1}{(n^{s-1}!)^s} \sum_{m \in \mathcal{M}} \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_s \in \mathcal{S} \\ \forall i \ \sigma_i(\hat{\ell}_i) = m_i}} \int_{I^s} f \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s} \right) d\xi_1 \dots d\xi_s. \end{aligned}$$

Or, pour tout $1 \leq i \leq s$, on a

$$\#\{\sigma_i \in \mathcal{S} : \sigma_i(\hat{\ell}_i) = m_i\} = (n^{s-1} - 1)!$$

D'où

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[f \circ W_\ell] &= \frac{1}{n^{s(s-1)}} \sum_{m \in \mathcal{M}} \int_{I^s} f \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s} \right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\ &= \frac{(n^s)^s}{(n^{s-1})^s} \sum_{m \in \mathcal{M}} \int_{I_{\ell m}} f(u_1, \dots, u_s) du_1 \dots du_s, \end{aligned}$$

en faisant les changements de variables

$$u_1 := \frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, u_s := \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}.$$

Donc

$$\mathbf{E}[f \circ W_\ell] = n^s \sum_{m \in \mathcal{M}} \int_{I_{\ell m}} f(u_1, \dots, u_s) du_1 \dots du_s = N \int_{I_\ell} f(u_1, \dots, u_s) du_1 \dots du_s.$$

Par suite

$$\mathbf{E}[Z] = \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \mathbf{E}[f \circ W_\ell] = \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \int_{I_\ell} f(u_1, \dots, u_s) du_1 \dots du_s = \mathcal{J}.$$

C'est le résultat. $\square$

3.3 Calcul de la variance de l'estimateur stratifié Sudoku

On étudie la variance de l'estimateur Z . À la fin de l'étude, on se limite à $f := \mathbf{1}_A$, où A est un sous-ensemble mesurable de I^s . Les variables aléatoires W_ℓ , $\ell \in \mathcal{L}$ ne sont pas indépendantes, il faut donc calculer des termes de covariance. On a

$$\mathbf{Var}(Z) = \mathbf{Var}\left(\frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} f \circ W_\ell\right) = \frac{1}{N^2} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \mathbf{Var}(f \circ W_\ell) + \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}).$$

Pour la première somme, on a, d'après la démonstration de la Proposition 3.2 :

$$\mathbf{Var}(f \circ W_\ell) = \mathbf{E}[(f \circ W_\ell)^2] - (\mathbf{E}[f \circ W_\ell])^2 = N \int_{I_\ell} (f(u))^2 du - N^2 \left(\int_{I_\ell} f(u) du \right)^2.$$

Donc

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \mathbf{Var}(f \circ W_\ell) = \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \left(\frac{1}{N} \int_{I_\ell} (f(u))^2 du - \left(\int_{I_\ell} f(u) du \right)^2 \right).$$

On analyse les termes de la seconde somme. Soient $\ell, \ell' \in \mathcal{L}$ avec $\ell \neq \ell'$. On a

$$\mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) = \mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] - \mathbf{E}[f \circ W_\ell] \mathbf{E}[f \circ W_{\ell'}].$$

Ensuite,

$$\begin{aligned}
& \mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] \\
&= \int_{\Omega} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma^{(1)}(\omega)(\hat{\ell}_1) - 1 + \xi_\ell^{(1)}(\omega)}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{\sigma^{(s)}(\omega)(\hat{\ell}_s) - 1 + \xi_\ell^{(s)}(\omega)}{n^s}\right) \\
&\quad \cdot f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{\sigma^{(1)}(\omega)(\hat{\ell}'_1) - 1 + \xi_{\ell'}^{(1)}(\omega)}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{\sigma^{(s)}(\omega)(\hat{\ell}'_s) - 1 + \xi_{\ell'}^{(s)}(\omega)}{n^s}\right) \\
&\quad d\mathbf{P}(\omega) \\
&= \frac{1}{(n^{s-1}!)^s} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_s \in \mathcal{S}} \\
&\quad \int_{I^s} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma_1(\hat{\ell}_1) - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{\sigma_s(\hat{\ell}_s) - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}\right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\
&\quad \int_{I'^s} f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{\sigma_1(\hat{\ell}'_1) - 1}{n^s} + \frac{\xi'_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{\sigma_s(\hat{\ell}'_s) - 1}{n^s} + \frac{\xi'_s}{n^s}\right) d\xi'_1 \dots d\xi'_s \\
&= \frac{1}{(n^{s-1}!)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m \neq m'}} \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_s \in \mathcal{S} \\ \sigma_i(\hat{\ell}_i) = m_i, \forall i \\ \sigma_i(\hat{\ell}'_i) = m'_i, \forall i}} \\
&\quad \int_{I^s} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}\right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\
&\quad \int_{I'^s} f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{m'_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi'_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{m'_s - 1}{n^s} + \frac{\xi'_s}{n^s}\right) d\xi'_1 \dots d\xi'_s.
\end{aligned}$$

On distingue deux cas.

1. S'il existe un unique indice $j \in \{1, \dots, s\}$ tel que $\ell_j \neq \ell'_j$, alors $\hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j$. Dans ce cas, on a :

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] &= \frac{1}{(n^{s-1}!)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j, m_i \neq m'_i}} \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_s \in \mathcal{S} \\ \forall i, \sigma_i(\hat{\ell}_i) = m_i \\ \forall i, \sigma_i(\hat{\ell}'_i) = m'_i}} \\
&\quad \int_{I^s} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}\right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\
&\quad \int_{I'^s} f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{m'_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi'_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{m'_s - 1}{n^s} + \frac{\xi'_s}{n^s}\right) d\xi'_1 \dots d\xi'_s.
\end{aligned}$$

On a

$$\begin{aligned}
\#\{\sigma_j \in \mathcal{S} : \sigma_j(\hat{\ell}_j) = m_j\} &= (n^{s-1} - 1)! \\
\#\{\sigma_i \in \mathcal{S} : \sigma_i(\hat{\ell}_i) = m_i, \sigma_i(\hat{\ell}'_i) = m'_i\} &= (n^{s-1} - 2)!
\end{aligned}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] &= \frac{1}{n^{s(s-1)}(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j \ m_i \neq m'_i}} \\ &\int_{I^s} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}\right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\ &\int_{I^s} f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{m'_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi'_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{m'_s - 1}{n^s} + \frac{\xi'_s}{n^s}\right) d\xi'_1 \dots d\xi'_s. \end{aligned}$$

Donc, en faisant les changements de variables

$$u_1 := \frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, u_s := \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s},$$

on obtient

$$\mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] = \frac{n^{s(s+1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j \ m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du'.$$

2. Si $\forall i \ \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i$, alors

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] &= \frac{1}{(n^{s-1}!)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \ m_i \neq m'_i}} \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_s \in \mathcal{S} \\ \forall i \ \sigma_i(\hat{\ell}_i) = m_i \\ \forall i \ \sigma_i(\hat{\ell}'_i) = m'_i}} \\ &\int_{I^s} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}\right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\ &\int_{I^s} f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{m'_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi'_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{m'_s - 1}{n^s} + \frac{\xi'_s}{n^s}\right) d\xi'_1 \dots d\xi'_s. \end{aligned}$$

Et comme plus haut

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] &= \frac{1}{n^{s(s-1)}(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \ m_i \neq m'_i}} \\ &\int_{I^s} f\left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{m_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell_s - 1}{n} + \frac{m_s - 1}{n^s} + \frac{\xi_s}{n^s}\right) d\xi_1 \dots d\xi_s \\ &\int_{I^s} f\left(\frac{\ell'_1 - 1}{n} + \frac{m'_1 - 1}{n^s} + \frac{\xi'_1}{n^s}, \dots, \frac{\ell'_s - 1}{n} + \frac{m'_s - 1}{n^s} + \frac{\xi'_s}{n^s}\right) d\xi'_1 \dots d\xi'_s. \end{aligned}$$

Donc, en faisant les mêmes changements de variables que précédemment,

$$\mathbf{E}[(f \circ W_\ell)(f \circ W_{\ell'})] = \frac{n^{s(s+1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \ m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du'.$$

Par ailleurs

$$\mathbf{E}[f \circ W_\ell] \mathbf{E}[f \circ W_{\ell'}] = N^2 \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du'.$$

Donc

1. Si

$$\exists! j \in \{1, \dots, s\} \quad \ell_j \neq \ell'_j$$

alors

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) &= \frac{n^{s(s+1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j \quad m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du' \\ &\quad - n^{2s} \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du'. \end{aligned}$$

2. Si

$$\forall i \in \{1, \dots, s\} \quad \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i$$

alors

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) &= \frac{n^{s(s+1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \quad m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du' \\ &\quad - n^{2s} \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du'. \end{aligned}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} &\frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) \\ &= \frac{1}{n^{2s}} \sum_{j=1}^s \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j}} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) + \frac{1}{n^{2s}} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \forall i \quad \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i}} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) \\ &= \sum_{j=1}^s \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j}} \left(\frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j \quad m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du' \right. \\ &\quad \left. - \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du' \right) \\ &\quad + \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \forall i \quad \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i}} \left(\frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \quad m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du' - \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du' \right). \end{aligned}$$

On écrit

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) = \sum_{j=1}^s \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j}} V_j(\ell, \ell') + \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \forall i \ \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i}} V_{s+1}(\ell, \ell'),$$

où

$$\begin{aligned} V_j(\ell, \ell') &:= \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j \ m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du' \\ &\quad - \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du', \quad 1 \leq j \leq s, \\ V_{s+1}(\ell, \ell') &:= \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \ m_i \neq m'_i}} \int_{I_{\ell m}} f(u) du \int_{I_{\ell' m'}} f(u') du' - \int_{I_\ell} f(u) du \int_{I_{\ell'}} f(u') du'. \end{aligned}$$

Finalement

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(Z) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \mathbf{Var}(f \circ W_\ell) + \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell \neq \ell'}} \mathbf{Cov}(f \circ W_\ell, f \circ W_{\ell'}) \\ &= \sum_{\ell \in \mathcal{L}} V_0(\ell) + \sum_{j=1}^s \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j}} V_j(\ell, \ell') + \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \forall i \ \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i}} V_{s+1}(\ell, \ell') \end{aligned}$$

où

$$V_0(\ell) := \frac{1}{n^s} \int_{I_\ell} (f(u))^2 du - \left(\int_{I_\ell} f(u) du \right)^2$$

On se limite désormais à

$$f := \mathbf{1}_A,$$

où A est un sous-ensemble mesurable de I^s . Alors

$$V_0(\ell) = \frac{1}{n^s} \int_{I_\ell} \mathbf{1}_A(u) du - \left(\int_{I_\ell} \mathbf{1}_A(u) du \right)^2 = \frac{1}{n^s} \lambda_s(A \cap I_\ell) - (\lambda_s(A \cap I_\ell))^2.$$

Pour $1 \leq j \leq s$,

$$V_j(\ell, \ell') = \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j \ m_i \neq m'_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell m}) \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \lambda_s(A \cap I_\ell) \lambda_s(A \cap I_{\ell'}).$$

Et

$$V_{s+1}(\ell, \ell') = \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \ m_i \neq m'_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell m}) \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \lambda_s(A \cap I_\ell) \lambda_s(A \cap I_{\ell'}).$$

- Soit $\ell \in \mathcal{L}$. Si $I_\ell \subset A$ ou si $I_\ell \cap A = \emptyset$,

$$V_0(\ell) = 0.$$

Si $I_\ell \not\subset A$ et $I_\ell \cap A \neq \emptyset$, comme

$$0 \leq n^s \lambda_s(A \cap I_\ell) \leq 1$$

et

$$V_0(\ell) = \frac{1}{n^{2s}} n^s \lambda_s(A \cap I_\ell) (1 - n^s \lambda_s(A \cap I_\ell)),$$

on a

$$0 \leq V_0(\ell) \leq \frac{1}{4n^{2s}}.$$

En notant

$$V_0 := \sum_{\ell \in \mathcal{L}} V_0(\ell),$$

on obtient la majoration

$$|V_0| = \sum_{\substack{\ell \in \mathcal{L} \\ I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset}} V_0(\ell) \leq \frac{1}{4n^{2s}} \#\{\ell \in \mathcal{L} : I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset\}.$$

- Soient $1 \leq j \leq s$ et $\ell, \ell' \in \mathcal{L}$ avec $\ell_j \neq \ell'_j$ et $\hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j$. Si $I_\ell \subset A$,

$$\begin{aligned} V_j(\ell, \ell') &= \frac{1}{n^s (n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j, m_i \neq m'_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \frac{1}{n^s} \lambda_s(A \cap I_{\ell'}) \\ &= \frac{1}{n^s} \sum_{m' \in \mathcal{M}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \frac{1}{n^s} \lambda_s(A \cap I_{\ell'}) = 0. \end{aligned}$$

De même, si $I_{\ell'} \subset A$,

$$V_j(\ell, \ell') = 0.$$

Et on a aussi, si $I_\ell \cap A = \emptyset$ ou $I_{\ell'} \cap A = \emptyset$

$$V_j(\ell, \ell') = 0.$$

Si $I_\ell \not\subset A$, $I_\ell \cap A \neq \emptyset$, $I_{\ell'} \not\subset A$ et $I_{\ell'} \cap A \neq \emptyset$, alors

$$\begin{aligned} 0 &\leq \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ m_j = m'_j \\ \forall i \neq j, m_i \neq m'_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell m}) \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) \\ &\leq \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^{s-1}} n^{s-1} (n^{s-1} (n^{s-1} - 1))^{s-1} \frac{1}{n^{s^2}} \frac{1}{n^{s^2}} = \frac{1}{n^{2s}} \end{aligned}$$

et

$$0 \leq \lambda_s(A \cap I_\ell) \lambda_s(A \cap I_{\ell'}) \leq \frac{1}{n^{2s}}.$$

Par suite

$$|V_j(\ell, \ell')| \leq \frac{1}{n^{2s}}.$$

En notant

$$V_j := \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j}} V_j(\ell, \ell'),$$

on obtient la majoration

$$|V_j| \leq \frac{1}{n^{2s}} \#\{(\ell, \ell') \in \mathcal{L}^2 : \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j, I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I'_\ell \not\subset A, I'_\ell \cap A \neq \emptyset\}.$$

- Soient $\ell, \ell' \in \mathcal{L}$ tels que $\forall i \in \{1, \dots, s\} \quad \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i$. Si $I_\ell \subset A$,

$$\begin{aligned} V_{s+1}(\ell, \ell') &= \frac{1}{n^s(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m, m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \quad m_i \neq m'_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \frac{1}{n^s} \lambda_s(A \cap I_{\ell'}) \\ &= \frac{1}{n^s} \sum_{m' \in \mathcal{M}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \frac{1}{n^s} \lambda_s(A \cap I_{\ell'}) = 0. \end{aligned}$$

De même, si $I'_\ell \subset A$,

$$V_j(\ell, \ell') = 0.$$

Et on a aussi, si $I_\ell \cap A = \emptyset$ ou $I_{\ell'} \cap A = \emptyset$

$$V_j(\ell, \ell') = 0.$$

Si $I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I_{\ell'} \not\subset A$ et $I_{\ell'} \cap A \neq \emptyset$, on utilise la décomposition

$$\lambda_s(A \cap I_\ell) \lambda_s(A \cap I_{\ell'}) = \sum_{m, m' \in \mathcal{M}} \lambda_s(A \cap I_{\ell m}) \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}).$$

Alors

$$V_{s+1}(\ell, \ell') = \sum_{m \in \mathcal{M}} \lambda_s(A \cap I_{\ell m}) V(\ell, \ell', m),$$

où

$$\begin{aligned} V(\ell, \ell', m) &:= \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} \sum_{\substack{m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \quad m'_i \neq m_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) - \sum_{m' \in \mathcal{M}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) \\ &= \left(\frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} - 1 \right) \sum_{\substack{m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \quad m'_i \neq m_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) \\ &\quad - \sum_{m' \in \mathcal{M} \setminus \{m' \in \mathcal{M} : \forall i \quad m'_i \neq m_i\}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}). \end{aligned}$$

On a

$$\forall x \in [0, 1] \quad 1 - (1 - x)^s \leq sx$$

donc, en prenant $x := \frac{1}{n^{s-1}}$

$$0 \leq \frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} - 1 \leq \frac{sn^{(s-1)^2}}{(n^{s-1} - 1)^s}$$

et

$$\#(\mathcal{M} \setminus \{m' \in \mathcal{M} : \forall i \ m'_i \neq m_i\}) = n^{s(s-1)} - (n^{s-1} - 1)^s \leq sn^{(s-1)^2}.$$

On en déduit

$$0 \leq \left(\frac{n^{s(s-1)}}{(n^{s-1} - 1)^s} - 1 \right) \sum_{\substack{m' \in \mathcal{M} \\ \forall i \ m'_i \neq m_i}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) \leq \frac{sn^{(s-1)^2}}{(n^{s-1} - 1)^s} \frac{(n^{s-1} - 1)^s}{n^{s^2}} = \frac{s}{n^{2s-1}}$$

et

$$0 \leq \sum_{m' \in \mathcal{M} \setminus \{m' \in \mathcal{M} : \forall i \ m'_i \neq m_i\}} \lambda_s(A \cap I_{\ell' m'}) \leq \frac{sn^{(s-1)^2}}{n^{s^2}} = \frac{s}{n^{2s-1}}.$$

Par conséquent

$$|V(\ell, \ell', m)| \leq \frac{s}{n^{2s-1}}$$

et

$$|V_{s+1}(\ell, \ell')| \leq \frac{n^{s(s-1)}}{n^{s^2}} \frac{s}{n^{2s-1}} = \frac{s}{n^{3s-1}}.$$

En notant

$$V_{s+1} := \sum_{\substack{\ell, \ell' \in \mathcal{L} \\ \forall i \ \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i}} V_{s+1}(\ell, \ell'),$$

on obtient la majoration

$$|V_{s+1}| \leq \frac{s}{n^{3s-1}} \# \{(\ell, \ell') \in \mathcal{L}^2 : \forall i \ \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i, I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I'_\ell \not\subset A, I'_\ell \cap A \neq \emptyset\}.$$

En combinant les majorations précédentes on obtient la majoration de la variance de Z suivante

$$\begin{aligned} \mathbf{Var}(Z) &\leq |V_0| + \sum_{j=1}^s |V_j| + |V_{s+1}| \\ &\leq \frac{1}{4n^{2s}} \# \{\ell \in \mathcal{L} : I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset\} \\ &\quad + \frac{1}{n^{2s}} \sum_{j=1}^s \# \{(\ell, \ell') \in \mathcal{L}^2 : \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j, \\ &\quad I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I'_\ell \not\subset A, I'_\ell \cap A \neq \emptyset\} \\ &\quad + \frac{s}{n^{3s-1}} \# \{(\ell, \ell') \in \mathcal{L}^2 : \forall i \ \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i, I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I'_\ell \not\subset A, I'_\ell \cap A \neq \emptyset\}. \end{aligned}$$

On obtient un ordre de la variance de Z sous une hypothèse de régularité sur la frontière du domaine A .

Proposition 3.3 Soit A un sous-ensemble mesurable de I^s . On suppose que, pour tout $1 \leq i \leq s$, il existe une fonction $f_i : \bar{I}^{s-1} \rightarrow \bar{I}$ lipschitzienne telle que

$$A = \{(u_1, \dots, u_s) \in I^s : u_i < f_i(\hat{u}_i)\},$$

où $\hat{u}_i := (u_1, \dots, u_{i-1}, u_{i+1}, \dots, u_s)$. Soit $\{W_\ell : \ell \in \mathcal{L}\}$ l'ensemble de points défini par (3.2.1) et

$$Z := \frac{1}{N} \sum_{\ell \in \mathcal{L}} \mathbf{1}_A \circ W_\ell$$

l'estimateur stratifié Sudoku de $\lambda_s(A)$. Alors

$$\mathbf{Var}(Z) \leq \left(\frac{C+2}{4} + 2s(C+2)^2 \right) \frac{1}{N^{1+1/s}},$$

où C est une constante de Lipschitz (pour la norme du maximum $\|\cdot\|_\infty$) de chaque fonction f_i .

Preuve. Pour $\ell \in \mathcal{L}$ et $1 \leq i \leq s$, on note

$$\hat{I}_{\ell,i} = \prod_{\substack{1 \leq j \leq s \\ j \neq i}} \left[\frac{\ell_j - 1}{n}, \frac{\ell_j}{n} \right).$$

D'après la géométrie de l'ensemble A , on a les propriétés suivantes :

- si $I_\ell \not\subset A$, alors il existe $\hat{u}_{\ell,i} \in \hat{I}_{\ell,i}$ tel que $nf_i(\hat{u}_{\ell,i}) < \ell_i$;
- si $I_\ell \cap A \neq \emptyset$, alors il existe $\hat{v}_{\ell,i} \in \hat{I}_{\ell,i}$ tel que $\ell_i < nf_i(\hat{v}_{\ell,i}) + 1$.

Par conséquent, on a

$$\#\{\ell \in \mathcal{L} : I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset\} \leq n^{s-1}(C+2),$$

pour tout $j : 1 \leq j \leq s$

$$\#\{(\ell, \ell') \in \mathcal{L}^2 : \ell_j \neq \ell'_j, \hat{\ell}_j = \hat{\ell}'_j,$$

$$I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I'_\ell \not\subset A, I'_\ell \cap A \neq \emptyset\} \leq n^{s-1}(C+2)^2$$

et

$$\#\{(\ell, \ell') \in \mathcal{L}^2 : \forall i \hat{\ell}_i \neq \hat{\ell}'_i, I_\ell \not\subset A, I_\ell \cap A \neq \emptyset, I_{\ell'} \not\subset A, I_{\ell'} \cap A \neq \emptyset\} \leq n^{2(s-1)}(C+2)^2.$$

Le résultat suit en utilisant ces inégalités dans la majoration de la variance de Z obtenue plus haut. $\square$

Ce résultat indique un gain de précision par rapport à une méthode MC usuelle d'un facteur de $N^{-1/s}$. Cet avantage s'amointrit quand la dimension augmente et semble limiter l'utilisation de cette stratification à des dimensions peu élevées. Faisant la même remarque que pour l'approche de MC stratifié simple, signalons que la technique de stratification Sudoku peut être intéressante pour des simulations nécessitant l'évaluation d'intégrales en dimension s comprise entre 2 et 6 : voir par exemple [62, 63, 64, 67, 72, 73, 19, 18, 20], pour une approche QMC et [59, 60, 61] pour une approche QMC hasardisée. C'est aussi le cas des simulations détaillées aux chapitres 4 et 5.

L'ordre théorique est confirmé numériquement dans la section suivante, où l'on remarque que la stratification Sudoku reste efficace même si l'hypothèse sur la frontière de A n'est pas satisfaite.

TABLE 3.1 – Ordre de convergence des variances des estimateurs MC et SS de $\mathcal{J}$

Dimension	MC	SS	Borne théorique
2	0,99	1,50	1,50
3	1,00	1,32	1,33
4	1,00	1,25	1,25

3.4 Essais numériques

Dans cette section, nous testons numériquement la méthode de Monte Carlo stratifiée Sudoku (SS) étudiée dans ce chapitre. Nous reprenons le calcul du volume du secteur de la boule unité déjà considéré au chapitre 2. Soit

$$Q := \{x \in I^s : \|x\|_2 \leq 1\}.$$

On veut calculer $\lambda_s(Q)$ en dimensions 2, 3 et 4 par la méthode stratifiée Sudoku et comparer les résultats obtenus à ceux des méthodes MC, MCS et LHS.

Dans un premier temps, le nombre de points N dans les simulations varie comme suit :

- pour $s = 2$, $N = 10^2, 20^2, \dots, 400^2 = 160\,000$ points ;
- pour $s = 3$, $N = 10^3, 20^3, \dots, 200^3 = 8\,000\,000$ points ;
- pour $s = 4$, $N = 10^4, 12^4, \dots, 40^4 = 2\,560\,000$ points.

Dans chaque cas, on calcule la variance des estimateurs en répétant M fois le calcul de $\lambda_s(Q)$ de façons indépendantes. Pour $M = 100, 200, \dots, 1\,000$ les résultats sont similaires. On a choisi de représenter les courbes de variance pour $M = 100$ et $M = 1\,000$ dans la Figure 3.2.

Sur les résultats obtenus pour $M = 1\,000$, une régression linéaire permet d'évaluer l'ordre de la variance. Les résultats sont indiqués dans la Table 3.1.

L'ordre obtenu dans les essais numériques est voisin de celui établi dans la proposition 3.3. Cela montre que l'hypothèse de régularité imposée sur la frontière du domaine d'intégration est trop restrictive, puisque dans le cas de Q , la fonction

$$f_i : \hat{u}_i \rightarrow \sqrt{1 - u_1^2 - \dots - u_{i-1}^2 - u_{i+1}^2 - \dots - u_s^2}$$

n'est pas lipschitzienne sur $\bar{I}^{s-1}$.

Nous comparons ensuite les performances, variance et temps de calcul de la méthode SS à celles des méthodes MC, MCS et LHS du chapitre précédent. Le nombre de points N dans les simulations varie comme suit :

- pour $s = 2$, $N = 20^2, 40^2, \dots, 400^2 = 160\,000$ points ;
- pour $s = 3$, $N = 10^3, 15^3, \dots, 100^3 = 1\,000\,000$ points ;

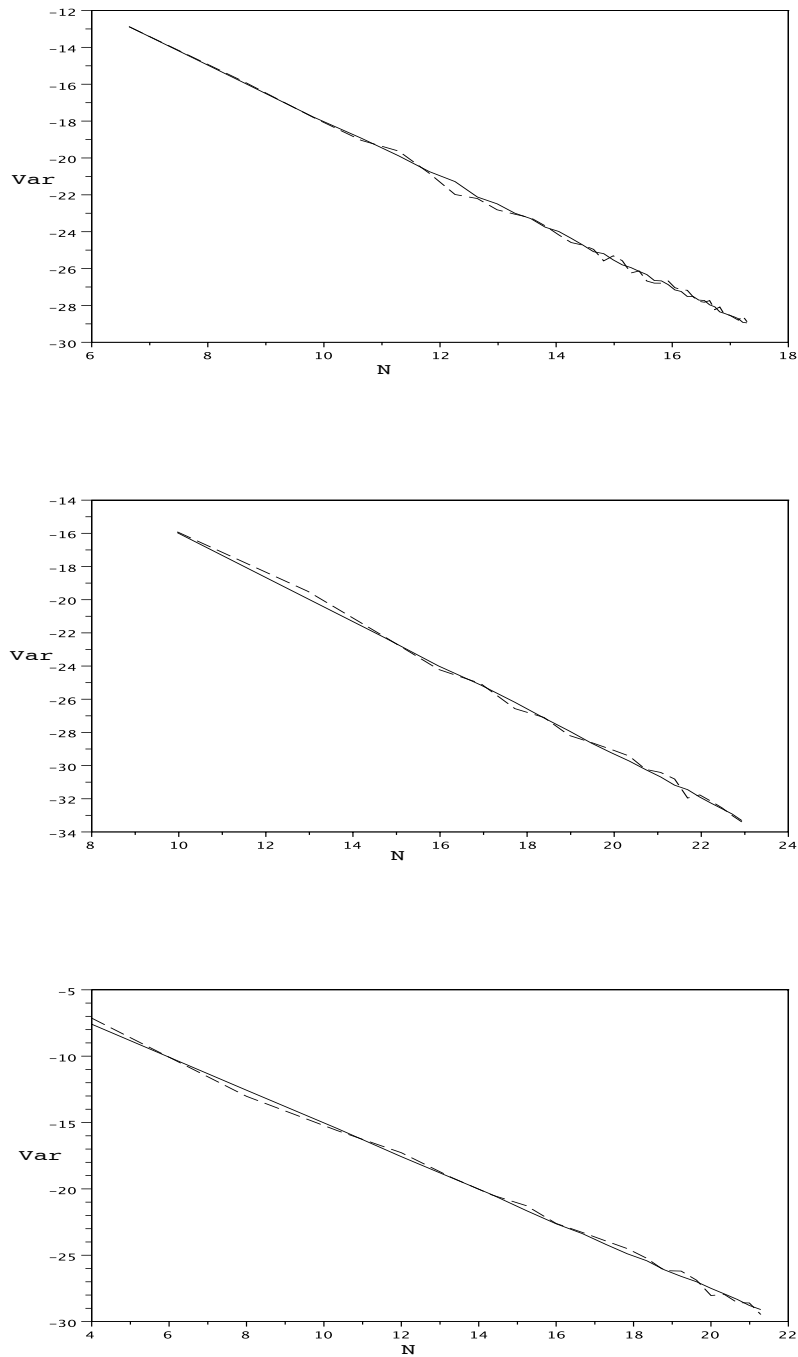


FIGURE 3.2 – Variance de l'estimateur SS de $\lambda_s(Q)$ en fonction du nombre de points N , pour $M = 100$ répétitions (tracés en pointillés) et $M = 1\,000$ répétitions (tracés continus). Dimension $s = 2$ et $10^2 \leq N \leq 400^2$ (en haut), dimension $s = 3$ et $10^3 \leq N \leq 200^3$ (au milieu), dimension $s = 4$ et $10^4 \leq N \leq 40^4$ (en bas). Échelles logarithmiques à base 2.

TABLE 3.2 – Ordre de convergence des variances des estimateurs MC, LHS, MCS et SS

dimension	MC	LHS	MCS	SS
2	0,99	1,00	1,48	1,50
3	1,00	1,00	1,34	1,33
4	1,01	1,00	1,26	1,24

- pour $s = 4$, $N = 6^4, 8^4, \dots, 40^4 = 2\,560\,000$ points.

Nous représentons les variances des estimateurs des différentes méthodes pour le calcul de $\lambda_s(Q)$ dans les Figures 3.3 (dimension $s = 2$), 3.4 (dimension $s = 3$) et 3.5 (dimension $s = 4$). L'estimation des variances se fait avec $M = 1\,000$ répétitions. Nous avons indiqué dans les mêmes figures l'évolution des temps de calcul en fonction du nombre N de points de la simulation.

L'efficacité est définie comme l'inverse du produit de la variance par le temps de calcul [44, 76]. Nous avons comparé les efficacités des méthodes MC, LHS, MCS et SS : voir la Figure 3.6. Celle de la méthode MCS est la meilleure, quand la dimension augmente. En supposant que la variance est $\mathcal{O}(N^{-\beta})$, une régression linéaire permet d'évaluer l'ordre de convergence β des variances, en fonction du nombre N de points utilisés. Les résultats sont indiqués dans la Table 3.2.

Pour terminer, nous reprenons le calcul de $\lambda_s(Q)$ par les méthodes MC, LHS, MCS, SS et une méthode quasi-Monte Carlo hasardisée par la technique d'Owen (MCO) introduite au chapitre 1. Dans ces essais numériques, le nombre N de points utilisés doit être une puissance de la base b , b étant le plus petit nombre premier supérieur ou égal à la dimension s .

Le résultat du calcul de $\lambda_2(Q)$ par les méthodes MC, LHS, MCS, SS et MCO est tracé en fonction du nombre N de points sur la Figure 3.7 (en haut), en échelle logarithmique à base 10. Le nombre points de simulation est $N = 2^{m+6}$, $1 \leq m \leq 13$, pour la méthode MCO et $N = (10m)^2$, $1 \leq m \leq 74$, pour les autres méthodes. De nouveau, les quadratures MC et LHS donnent les résultats les moins bons, les méthodes MCS et MCO donnent des résultats proches et la méthode SS montre une convergence très rapide. Un inconvénient de l'approche MCO, est le temps de calcul. Sur la même Figure 3.7 (en bas), on compare les résultats de l'estimation de $\lambda_3(Q)$ par ces différentes méthodes en fonction du nombre de particules $N = (10m)^3$, $1 \leq m \leq 9$ pour les méthodes MC, LHS, MCS et SS et $N = 3^{(m+5)}$ pour la simulation d'Owen avec $1 \leq m \leq 7$.

Les ordres de convergence des variances (définis comme précédemment) obtenus par régression linéaire sont indiqués dans la Table 3.3.

Les résultats obtenus par les méthodes SS et MCO sont très proches. L'avantage de la technique SS réside dans son implémentation simple.

Supposant que la variance s'exprime par $\mathbf{Var} = cN^{-\beta}$, avec c constante, on voit que les constantes de majoration des différentes méthodes diminuent en passant de la méthode MC aux méthodes LHS, MCS, MCO et SS respectivement. On remarque que les constantes des méthodes MCO et SS sont comparables.

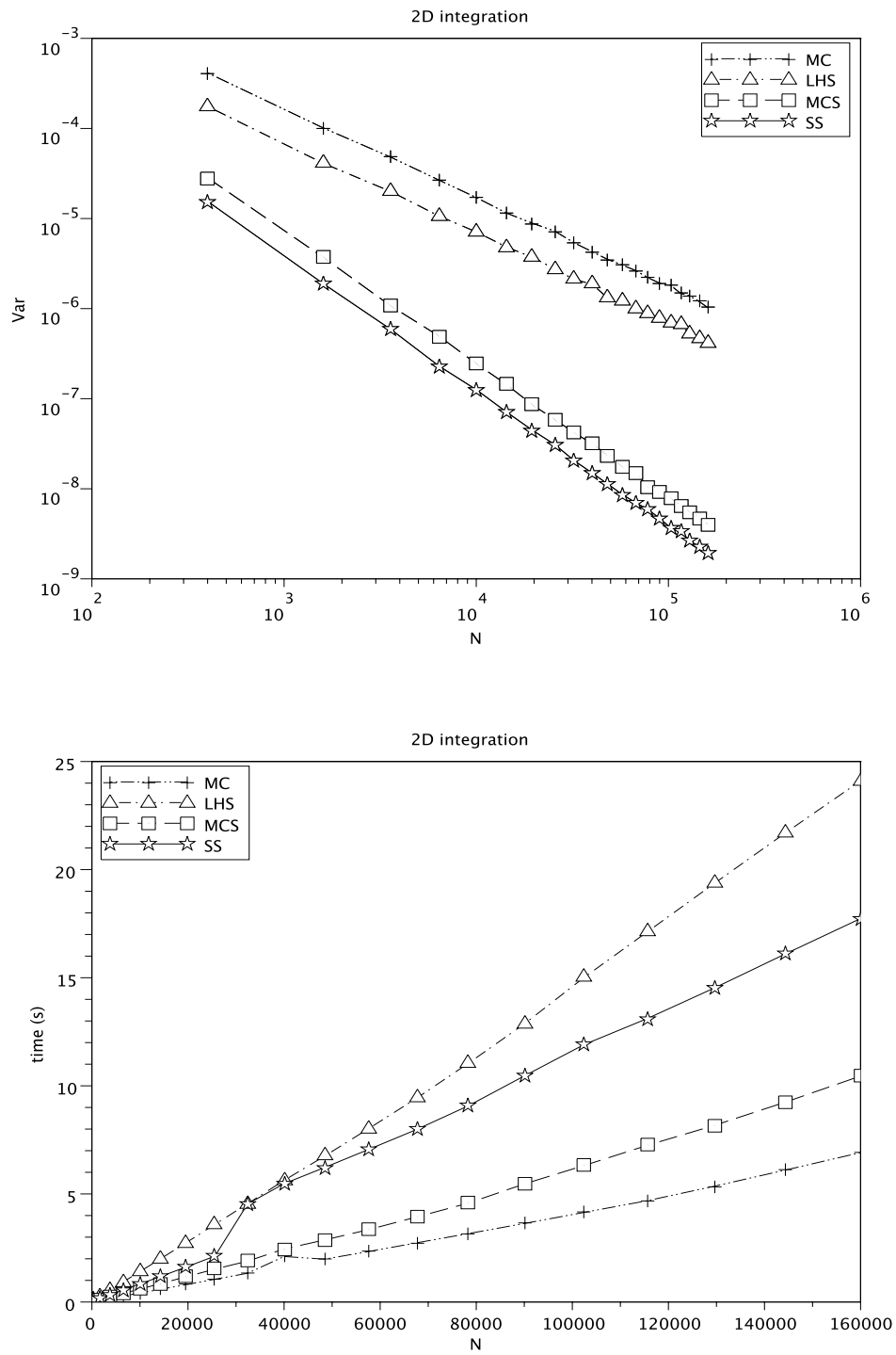


FIGURE 3.3 – Dimension $s = 2$. Variances (en haut) et temps de calcul (en bas) pour 1 000 estimations indépendantes de $\lambda_2(Q)$ en fonction du nombre de points N ($N = 20^2, \dots, 400^2$). Comparaison des méthodes MC (+), LHS ($\triangle$), MCS ($\square$) et SS ($\star$).

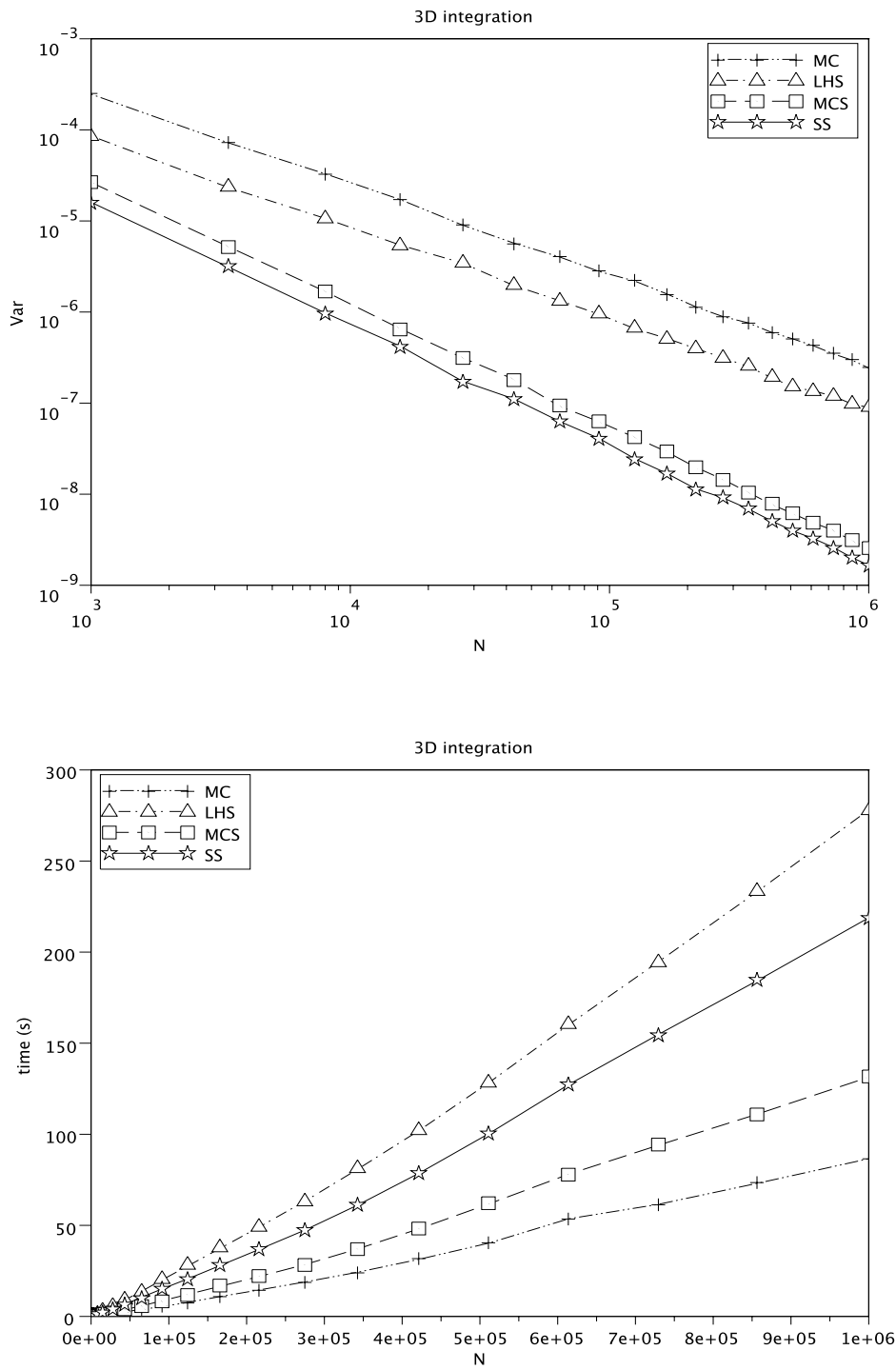


FIGURE 3.4 – Dimension $s = 3$. Variances (en haut) et temps de calcul (en bas) pour 1 000 estimations indépendantes de $\lambda_3(Q)$ en fonction du nombre de points N ($N = 10^3, \dots, 10^6$). Comparaison des méthodes MC (+), LHS (Δ), MCS ($\square$) et SS ($\star$).

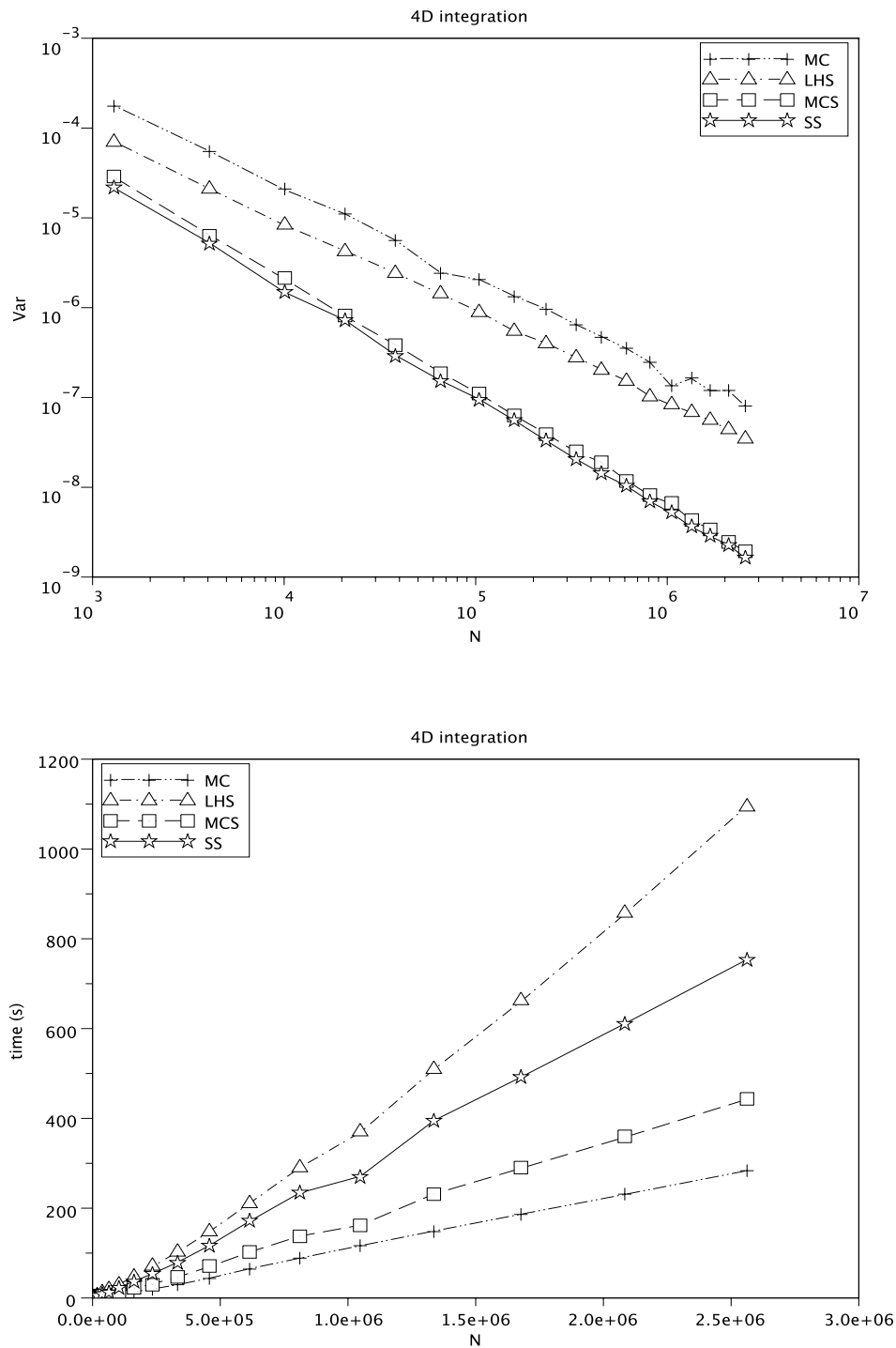


FIGURE 3.5 – Dimension $s = 4$. Variances (en haut) et temps de calcul (en bas) pour 1 000 estimations indépendantes de $\lambda_4(Q)$ en fonction du nombre de points N ($N = 6^4, \dots, 40^4$). Comparaison des méthodes MC (+), LHS ($\triangle$), MCS ($\square$) et SS ($\star$).

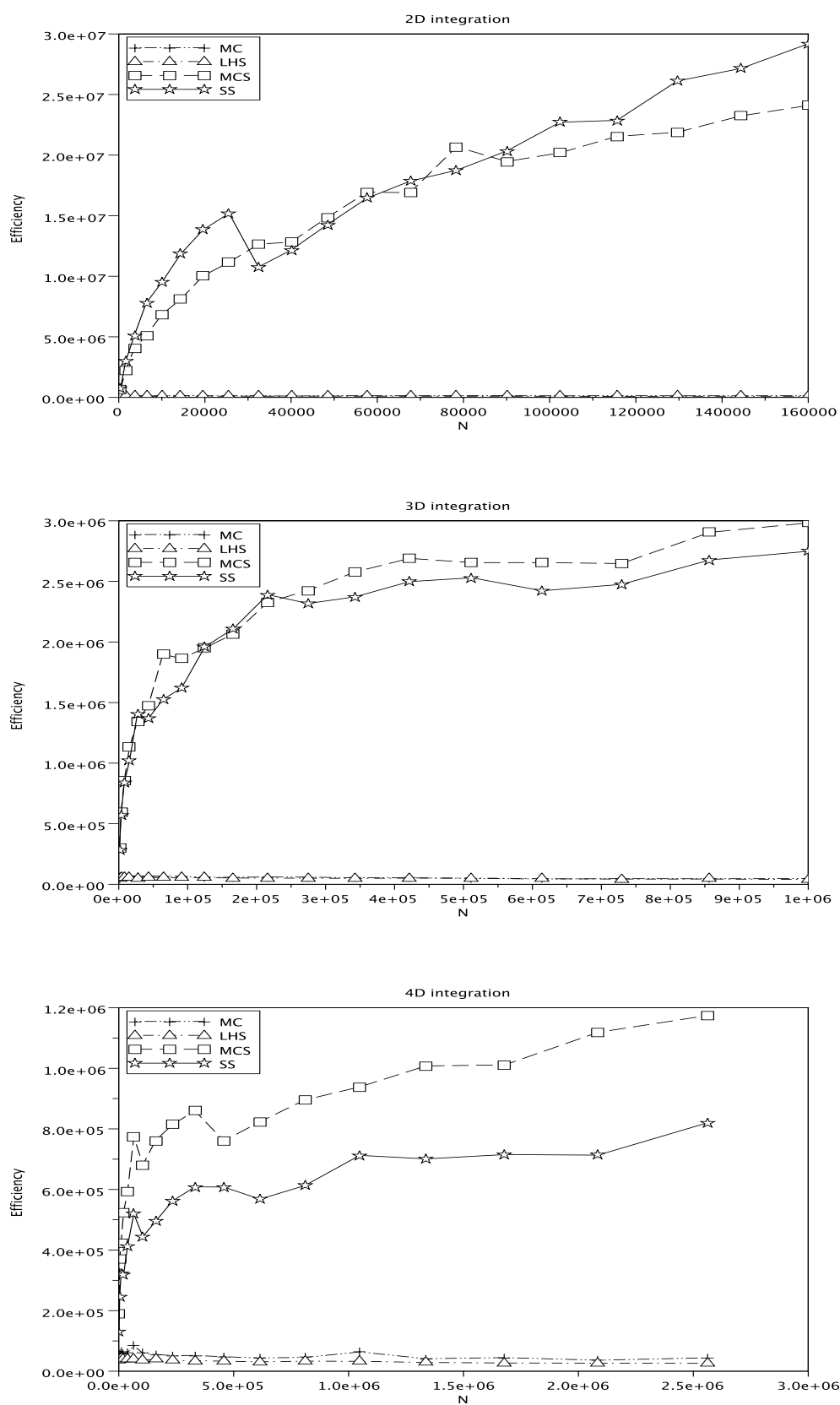


FIGURE 3.6 – Efficacités des méthodes MC (+), LHS ($\triangle$), MCS ($\square$) et SS ($\star$) en fonction du nombre de points N en dimension $s = 2$ (en haut), $s = 3$ (au milieu) et $s = 4$ (en bas).

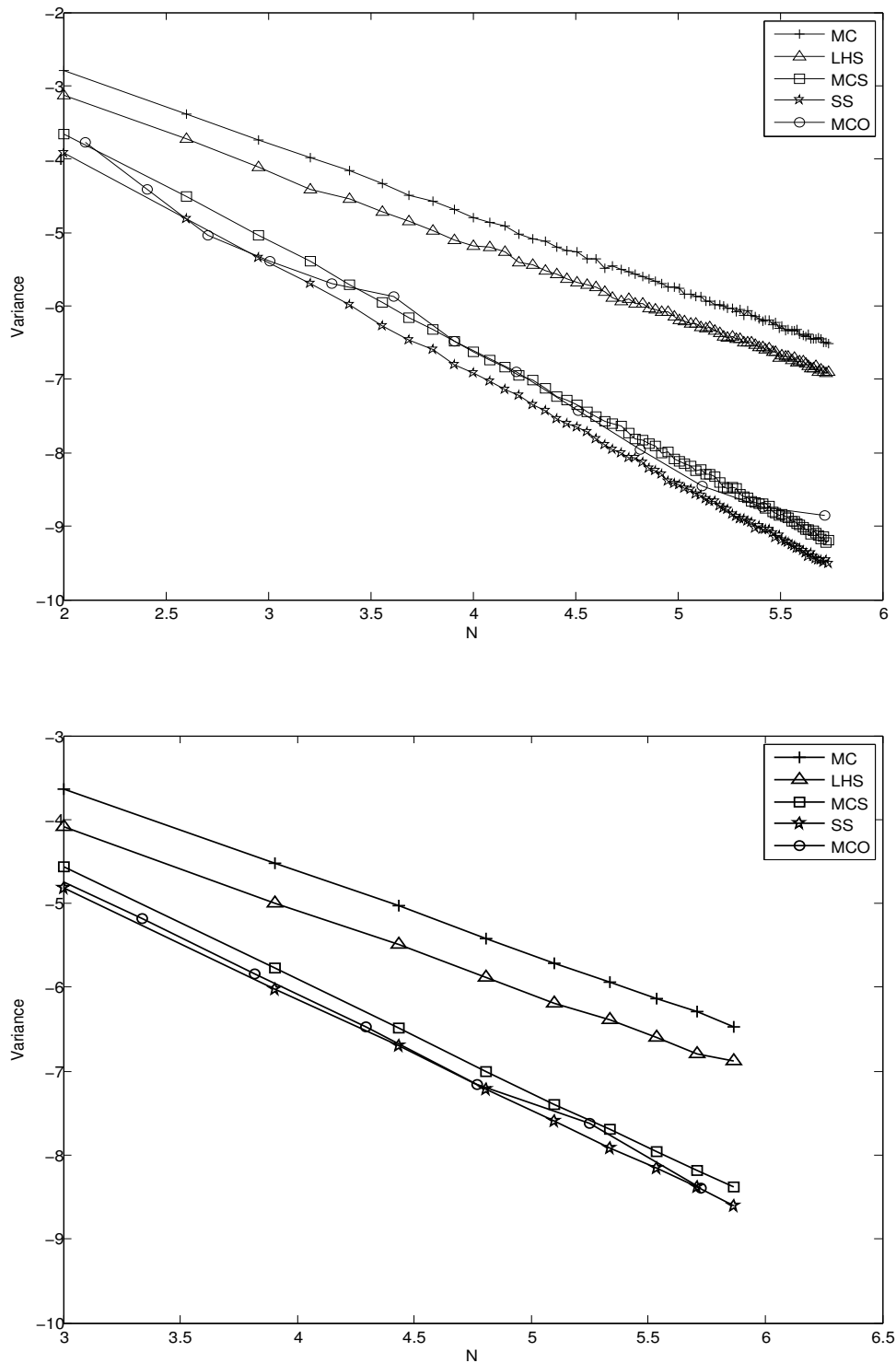


FIGURE 3.7 – Valeurs des variances obtenues en répétant 1 000 fois de manière indépendante le calcul de $\lambda_2(Q)$ (en haut) et $\lambda_3(Q)$ (en bas) en fonction de N : comparaison des méthodes MC (+), LHS ($\triangle$), MCS ($\square$), SS ($\star$) et MCO ($\circ$).

TABLE 3.3 – Ordre de convergence des variances des estimateurs MC, LHS, MCS, SS et MCO

dimension	MC	LHS	MCS	SS	MCO
2	0,99	1,00	1,49	1,50	1,43
3	1,00	1,00	1,33	1,32	1,32

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons analysé une technique de stratification appelée Sudoku qui utilise des points aléatoires ayant une meilleure répartition dans l'hypercube unité que ceux d'une méthode de Monte Carlo classique. Elle possède les propriétés de stratification de la méthode stratifiée simple et aussi celles de la méthode LHS du chapitre précédent. Dans le cadre de l'évaluation des intégrales de fonctions indicatrices, l'analyse de la variance a confirmé qu'il s'agit bien d'une technique de réduction de la variance. Des essais numériques menés ont montré que cette approche donne des résultats très satisfaisants en ce qui concerne la précision et le temps de calcul.

Dans les chapitres qui suivent, nous allons montrer que cette technique de stratification peut être utilisée dans des simulations Monte Carlo d'équations différentielles ou intégrales simples.

Chapitre 4

Méthode de Monte Carlo stratifiée pour la diffusion

4.1 Introduction

L'équation de la chaleur est une équation aux dérivées partielles parabolique, introduite par Fourier en 1811, pour décrire certains phénomènes physiques comme la diffusion. Celle-ci traduit le déplacement de matière dans un système physique, des zones de forte concentration vers celles de faible concentration.

L'équation de diffusion en milieu infini uni-dimensionnel s'écrit

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right)(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (4.1.1)$$

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.1.2)$$

où c est la concentration de matière en x à l'instant t et $D = D(x, t)$ est le coefficient de diffusion. On suppose que la concentration initiale c_0 est une fonction intégrable et positive. Dans le cas où le domaine est borné, il faut ajouter des conditions aux limites.

La matière est conservée au cours du temps et cela se traduit par l'égalité

$$\forall t \geq 0 \quad \int_{\mathbb{R}} c(x, t) dx = \int_{\mathbb{R}} c_0(x) dx.$$

L'équation peut se généraliser en dimension quelconque, et la diffusion peut être combinée avec d'autres phénomènes, comme la convection, ou la réaction. Les méthodes numériques classiques permettent d'approcher la solution. Les plus utilisées sont celles des différences finies, des éléments finis ou des volumes finis. Les méthodes de Monte Carlo se sont avérées efficaces pour résoudre ce problème, par exemple en dimension élevée, dans un domaine à frontière irrégulière, quand la diffusion n'est pas prépondérante par rapport à d'autres phénomènes, ou quand on cherche seulement les valeurs de la solution en certains points du domaine d'étude [7, 41, 35, 117, 9, 34, 54, 37, 128, 129, 82]. Elles sont basées sur une interprétation probabiliste de l'équation de diffusion et sur l'utilisation des marches aléatoires de particules. Des variantes quasi-Monte Carlo ont aussi été développées : voir [90, 68] pour l'équation de la chaleur et [69, 66, 70, 106] pour les phénomènes de convection-diffusion ou de réaction-diffusion. L'étude menée dans [90] montre

qu'il ne suffit pas de remplacer les points pseudo-aléatoires par des points à discrédance faible pour améliorer les résultats de la simulation, car les points déterministes ne vérifient pas les propriétés d'indépendance requises. Des techniques supplémentaires, notamment celle du tri des particules de simulation permettent de résoudre ce problème et d'accroître l'efficacité des méthodes QMC par rapport aux méthodes MC. Cette technique avait auparavant été utilisée pour la simulation QMC de l'équation de Boltzmann des gaz raréfiés [62, 63, 64].

Dans ce chapitre, une méthode de résolution MC stratifiée est proposée dans le but d'améliorer la convergence de la simulation MC usuelle. Elle suit les étapes principales de [68] et utilise les ensembles de points de la méthode de Monte Carlo stratifiée Sudoku (SS) développée au chapitre 3. Nous comparons les résultats de la simulation SS avec ceux d'une méthode MC classique et des méthodes MCS et LHS du chapitre 2.

Nous commençons par la description de la méthode dans le cas classique d'un coefficient de diffusion constant. Nous continuons par la mise au point d'une généralisation de la méthode dans le cas d'un milieu hétérogène (coefficient de diffusion variable). Une partie des résultats de ce chapitre a été publiée dans [24].

4.2 Simulation de l'équation de diffusion

Quand le coefficient de diffusion est constant (milieu homogène) l'équation de diffusion en dimension 1 s'écrit :

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) = D_0 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(x, t), \quad (4.2.1)$$

avec $D = D_0$. À l'instant initial $t = 0$, on considère une population de particules dont la concentration approche la concentration initiale c_0 . On divise le temps en sous-intervalles de longueur Δt . À chaque pas de temps, chaque particule effectue un déplacement aléatoire sur l'axe des x , suivant une distribution gaussienne de moyenne 0 et de variance σ^2 (que l'on indique dans la suite). Considérons une particule en $x = 0$ à l'instant initial. Après le premier pas de temps, on trouve une particule dans l'intervalle de longueur dx autour de x avec une probabilité $P_1(x)dx$ donnée par

$$P_1(x)dx = \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\sigma} dx.$$

Durant le pas de temps suivant, la particule se déplace en effectuant un pas de même loi normale. La probabilité de trouver une particule dans l'intervalle de longueur dx après le deuxième pas de temps est :

$$P_2(x)dx = dx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-y^2/2\sigma^2} e^{-(x-y)^2/2\sigma^2}}{2\pi\sigma^2} dy = \frac{e^{-x^2/4\sigma^2}}{\sqrt{4\pi}\sigma} dx,$$

et ainsi de suite. Après k pas de temps on peut vérifier que

$$P_k(x)dx = \frac{e^{-x^2/2k\sigma^2}}{\sqrt{2k\pi}\sigma} dx.$$

En choisissant $\sigma^2 = 2D_0\Delta t$ et en notant $t_k = k\Delta t$, on a

$$P_k(x) = \frac{e^{-x^2/4D_0t_k}}{\sqrt{4\pi D_0t_k}}.$$

On retrouve la *solution fondamentale* de l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$:

$$E(x, t) := \frac{e^{-x^2/4D_0t}}{\sqrt{4\pi D_0t}}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (4.2.2)$$

Elle vérifie (4.2.1) et la condition d'émission initiale en $x = 0$, puisque

$$E(x, 0) = \delta(x),$$

où δ est la mesure de Dirac en 0. Si le départ de la particule est en $x = x_0$, la solution à l'instant t est :

$$E(x, t) := \frac{e^{-(x-x_0)^2/4D_0t}}{\sqrt{4\pi D_0t}}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0.$$

D'après (4.2.2), si une particule est en $x = 0$ au temps $t = 0$, la densité de probabilité de trouver une particule à la position x au temps t est

$$f_X(x) = \frac{e^{-x^2/4D_0t}}{\sqrt{4\pi D_0t}}, \quad (4.2.3)$$

qui est la densité de la loi normale centrée et de variance $2D_0t$.

Le principe du schéma de Monte Carlo de simulation de l'équation de diffusion est alors le suivant. On approche la concentration initiale par une population de particules. Chaque particule de simulation se déplace pendant un pas de temps Δt d'une distance $X(\Delta t)$, où $X(t)$ est une variable aléatoire dont la densité est donnée par (4.2.3). Donc le déplacement Δx durant le temps Δt est donné par :

$$\Delta x = \sqrt{2D_0\Delta t}Z, \quad (4.2.4)$$

Z étant une variable aléatoire de loi normale centrée et réduite.

Pour apprécier la qualité de cette méthode de simulation, nous avons repris des essais indiqués dans [28]. Il s'agit de calculer la concentration d'ions en différents points d'un milieu autour d'une source d'ions qui émet des particules (voir [87] pour le contexte biologique). Dans ce premier exemple, trois émissions de 2^{10} particules chacune ont lieu à partir de l'origine $x = 0$: la première émission est à l'instant initial $t = 0$, les deux autres surviennent respectivement aux instants $t = 10$ et $t = 20$. La simulation est menée jusqu'au temps final $T = 30$. Le milieu considéré est homogène avec un coefficient de diffusion constant : $D_0 = 4000$; on simule l'équation de diffusion avec la méthode de Monte Carlo précédente. La Figure 4.1 représente l'évolution de la concentration dans les intervalles $[40, 60]$ (en haut) et $[160, 180]$ (en bas). La courbe obtenue par la méthode MC est comparée aux valeurs exactes calculées à l'aide de la solution fondamentale.

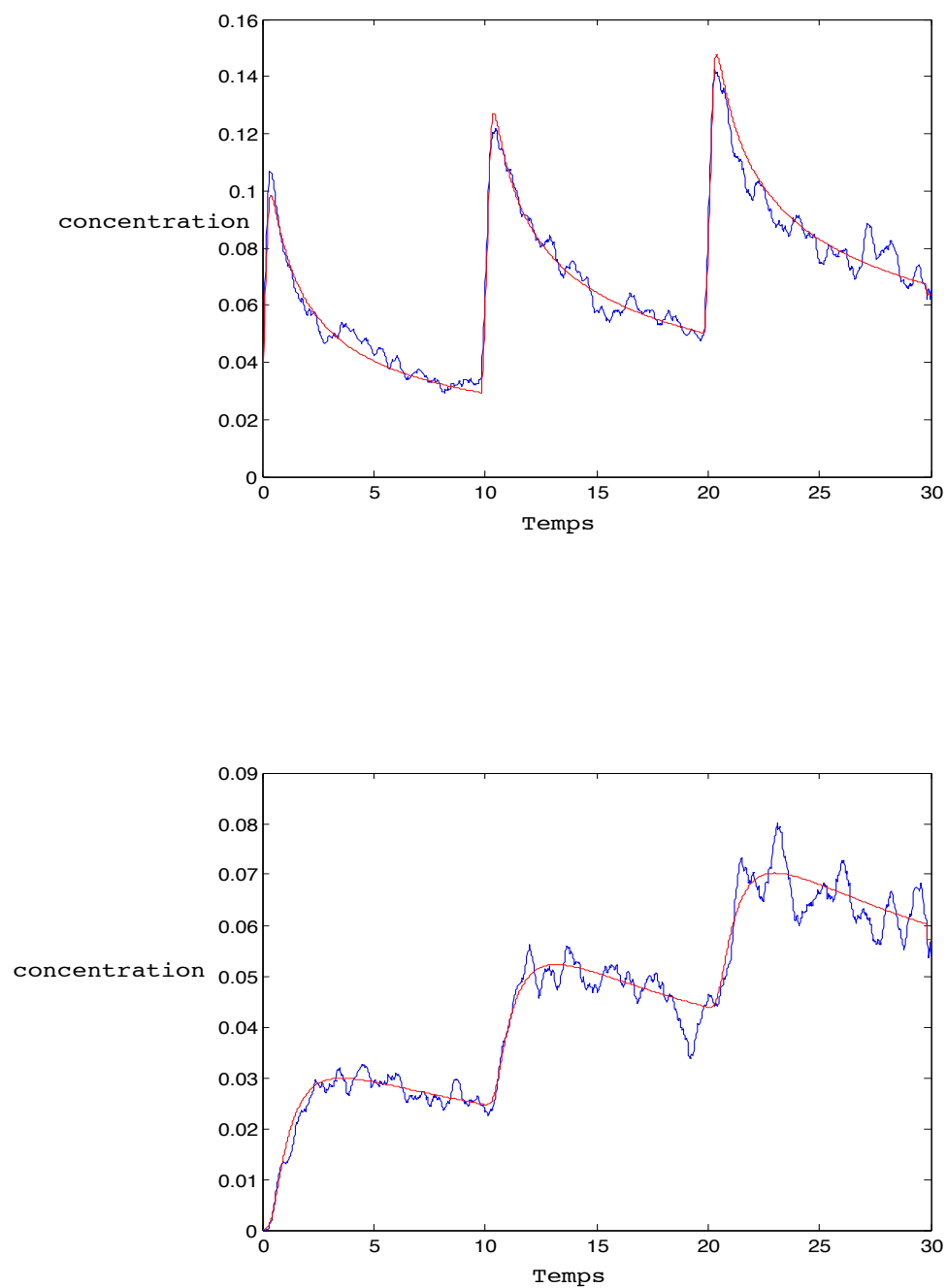


FIGURE 4.1 – Évolution de la concentration dans les intervalles $[40, 60]$ (en haut) et $[160, 180]$ (en bas). Comparaison de la solution exacte (ligne régulière) et de la simulation MC (ligne oscillante) ; coefficient de diffusion constant.

Nous voyons que si la simulation suit l'évolution de la concentration, elle introduit des oscillations parasites. La suite du chapitre indique une méthode permettant de réduire ces oscillations, en utilisant dans la simulation Monte Carlo les échantillons de la stratification Sudoku.

Lécot et El Khettabi ont proposé une version quasi-Monte Carlo de cette méthode dans [68]. Nous rappelons plus loin un résultat de convergence pour cette approche.

4.3 Algorithme de simulation Monte Carlo stratifié en milieu homogène

On suppose que le coefficient de diffusion D est constant et que la donnée initiale vérifie

$$\int_{\mathbb{R}} c_0(x) dx = 1.$$

En utilisant la solution fondamentale E de l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, on obtient que pour tout $\tau \geq 0$, la solution c de (4.1.1) vérifie

$$c(x, t) = \int_{\mathbb{R}} E(x - w, t - \tau) c(w, \tau) dw, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > \tau. \quad (4.3.1)$$

Pour la simulation, on choisit un entier $n \in \mathbb{N}^*$ et on note $N = n^2$. On fixe un pas de temps Δt . On cherche une approximation de la solution $c(x, t_p)$ aux instants $t_p = p\Delta t$ par une somme de masses de Dirac en des positions $x_1^p, \dots, x_N^p$ à déterminer ; on note cette approximation :

$$c^p(x) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^p).$$

La première étape de l'algorithme consiste à échantillonner la distribution initiale c_0 en construisant un ensemble de points $\{x_1^0, \dots, x_N^0\}$ pour que

$$c^0(x) \approx c_0(x).$$

Cela peut s'effectuer par la méthode d'inversion :

$$x_k^0 = C_0^{-1}\left(\frac{2k-1}{2N}\right), \quad 1 \leq k \leq N,$$

où C_0 est la fonction de répartition associée à c_0 :

$$C_0(x) := \int_{-\infty}^x c_0(y) dy, \quad x \in \mathbb{R}.$$

On suppose qu'à l'instant t_p on connaît l'approximation de $c(x, t_p)$:

$$c^p(x) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^p).$$

La détermination des positions des particules à l'instant t_{p+1} se fait en deux étapes :

1. renuméroter les particules de l'étape p suivant leur position ;
2. effectuer une intégration Monte Carlo en utilisant un ensemble de points stratifié.

Nous allons développer chacune de ces étapes.

1. *Renumérotation des particules.* Les particules sont ordonnées selon leurs positions croissantes

$$x_1^p \leq x_2^p \leq \dots \leq x_N^p.$$

À chaque pas de temps il faut effectuer une intégration numérique, le tri permet de minimiser l'amplitude des sauts de la fonction à intégrer. L'idée de tri a été introduite par C. Lécot pour la résolution de l'équation de Boltzmann, d'abord pour un problème uni-dimensionnel [62, 63, 64] puis généralisée au cas multi-dimensionnel [67].

Elle a aussi été utilisée pour la simulation quasi-Monte Carlo de la diffusion [68, 69, 66, 70] et des chaînes de Markov [72, 73, 19, 18, 60, 20] ; pour une approche QMC hasardisée de la résolution des chaînes de Markov, voir [59, 60, 61].

2. *Intégration Monte Carlo stratifiée.* En utilisant (4.3.1), on obtient une approximation de la solution à l'instant t_{p+1} :

$$\tilde{c}^{p+1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N E(x - x_k^p, \Delta t).$$

Cette approximation n'est pas une somme de mesures de Dirac : pour l'obtenir, on effectue une quadrature Monte Carlo. Soit

$$f(u) := \sqrt{2D\Delta t}\Phi^{-1}(u), \quad u \in (0, 1),$$

où Φ est la fonction de répartition de la loi normale $\mathcal{N}(0, 1)$. Pour tout sous-ensemble mesurable A de $\mathbb{R}$, on note $\mathbf{1}_A$ sa fonction indicatrice. On a alors

$$\int_{\mathbb{R}} \tilde{c}^{p+1}(x) \mathbf{1}_A(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \int_I \mathbf{1}_A(x_k^p + f(u)) du, \quad (4.3.2)$$

Pour $1 \leq k \leq N$, soit $\mathbf{1}_{I_k}$ la fonction indicatrice de l'intervalle

$$I_k := \left[\frac{k-1}{N}, \frac{k}{N} \right).$$

On transforme le membre de droite de (4.3.2) en une intégrale double :

$$\int_{\mathbb{R}} \tilde{c}^{p+1}(x) \mathbf{1}_A(x) dx = \int_{I^2} C_A^{p+1}(u) du, \quad (4.3.3)$$

où

$$C_A^{p+1}(u) := \sum_{k=1}^N \mathbf{1}_{I_k}(u_1) \mathbf{1}_A(x_k^p + f(u_2)), \quad u = (u_1, u_2) \in I \times (0, 1).$$

On considère un ensemble de points stratifié Sudoku :

$$\mathcal{W} = \{W_\ell : \ell = (\ell_1, \ell_2), 1 \leq \ell_1, \ell_2 \leq n\}$$

défini par

$$W_\ell = (W_{\ell,1}, W_{\ell,2}) := \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma^1(\ell_2) - 1}{n^2} + \frac{\xi_\ell^1}{n^2}, \frac{\ell_2 - 1}{n} + \frac{\sigma^2(\ell_1) - 1}{n^2} + \frac{\xi_\ell^2}{n^2} \right),$$

où σ^1 et σ^2 sont des bijections aléatoires de $\{1, \dots, n\}$ dans $\{1, \dots, n\}$ et ξ_ℓ^1, ξ_ℓ^2 sont des variables aléatoires uniformément distribuées sur I . Toutes ces variables sont supposées indépendantes. Cet ensemble vérifie les deux propriétés d'uniformité suivantes :

(P1) il y a un point unique de l'ensemble dans chaque intervalle de la forme

$$\left[\frac{\ell_1 - 1}{n}, \frac{\ell_1}{n} \right) \times \left[\frac{\ell_2 - 1}{n}, \frac{\ell_2}{n} \right), \quad 1 \leq \ell_1 \leq n, 1 \leq \ell_2 \leq n;$$

(P2) il y a un point unique de l'ensemble dans chaque intervalle de la forme

$$I \times \left[\frac{k - 1}{n^2}, \frac{k}{n^2} \right) \quad \text{et} \quad \left[\frac{k - 1}{n^2}, \frac{k}{n^2} \right) \times I, \quad 1 \leq k \leq n^2.$$

On définit l'approximation $c^{p+1}(x)$ de la solution exacte $c(x, t_{p+1})$ en faisant une intégration MC de l'intégrale du membre de droite de (4.3.3) à l'aide de cet ensemble : pour tout sous-ensemble mesurable $A \subset \mathbb{R}$

$$\int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_A(x) c^{p+1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{\ell_1=1}^n \sum_{\ell_2=1}^n C_A^{p+1}(W_\ell).$$

Cette équation permet de calculer facilement les nouvelles positions des particules de simulation. On établit une correspondance entre les points de $\mathcal{W}$ et les positions ordonnées x_k^p . Pour $u \in [0, 1)$, on note $k(u) := \lfloor Nu \rfloor$, où $\lfloor \cdot \rfloor$ désigne la partie entière. Les positions des particules à l'instant t_{p+1} sont alors définies par :

$$x_{k(W_{\ell,1})}^{p+1} = x_{k(W_{\ell,1})}^p + f(W_{\ell,2}), \quad \ell = (\ell_1, \ell_2), \quad 1 \leq \ell_1, \ell_2 \leq n. \quad (4.3.4)$$

Ainsi, la première projection $W_{\ell,1}$ de l'ensemble stratifié est utilisée pour sélectionner la particule à déplacer, tandis que la deuxième projection $W_{\ell,2}$ détermine le déplacement aléatoire. Remarquons que les propriétés de répartition de l'ensemble stratifié Sudoku assurent que chaque particule est considérée une seule fois pour une diffusion durant chaque pas de temps.

À la place de l'ensemble stratifié Sudoku $\mathcal{W}$, on peut prendre les ensembles stratifiés étudiés au chapitre 2 : l'ensemble stratifié simple de l'approche MCS, ou l'ensemble de la stratégie LHS. Dans ces deux approches, on continue de réordonner les particules par

position à chaque pas de temps. Les trois méthodes (SS, MCS et LHS) sont comparées dans des essais numériques plus loin.

La méthode de Monte Carlo classique de simulation de l'équation de diffusion consiste à approcher la distribution initiale puis à faire évoluer les particules selon l'équation

$$x_k^{p+1} = x_k^p + f(U_k), \quad 1 \leq k \leq N, \quad (4.3.5)$$

où $\{U_1, \dots, U_N\}$ est une famille indépendante de variables aléatoires de loi uniforme sur I . Dans cette simulation les particules ne sont pas triées.

Un algorithme QMC a été proposé et analysé dans [90, 68], où une borne d'erreur théorique est prouvée. Pour des entiers $b \geq 2$ et $m \geq 1$ on pose $N := b^m$ le nombre de particules. Soit $Y = \{y_0, y_1, \dots\} \subset I^2$ une suite à faible discrédance. On note :

- $Y^p = \{y_q : pN \leq q < (p+1)N\}$;
- π' la projection définie par $\pi'(y_1, y_2) := y_1$ et π'' celle définie par $\pi''(y_1, y_2) := y_2$.

On suppose que l'ensemble des points $\pi'(Y^p)$ est un réseau- $(0, m, 1)$ en base b (voir [96, 98]) et que $\pi''(Y^p) \subset (0, 1)$.

Soit $X^0 := \{x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0\}$ un ensemble de particules tel que la densité c_0 soit approchée par la somme de mesures de Dirac

$$c^0(x) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^0) \simeq c_0(x).$$

Soit X^p l'ensemble de particules à l'instant t_p , obtenu en faisant des quadratures quasi-Monte Carlo dans l'algorithme précédent : on remplace les ensembles de points stratifiés Sudoku $\mathcal{W}$ par les segments Y^p de la suite Y . La notion de discrédance à l'origine par rapport à une densité de probabilité sur $\mathbb{R}$ généralise la discrédance à l'origine (par rapport à la mesure de Lebesgue sur I).

Proposition 4.1 *La discrédance à l'origine de X^p par rapport à c_p vérifie :*

$$D_N^*(X^p; c_p) \leq D_N^*(X^0; c_0) + b^{\lfloor m/2 \rfloor} \sum_{l=0}^{p-1} D_N(Y^l) + \frac{p}{b^{\lfloor m/2 \rfloor}}.$$

Ce résultat indique un ordre (déterministe) de convergence en $\mathcal{O}(1/N^{1/2})$, le même que l'ordre (stochastique) de la méthode de Monte Carlo. Les résultats des expériences numériques repris dans [68] montrent un ordre en $\mathcal{O}(1/N^{0.71})$. De plus la majoration de la proposition précédente croît linéairement avec le temps. Ce n'est pas le comportement de la discrédance calculée dans les mêmes expériences numériques.

Essais numériques

Dans cette section, nous vérifions la pertinence de l'algorithme défini précédemment en reprenant des essais de [68] sur l'équation de la diffusion. On considère les équations (4.1.1) et (4.1.2) avec la condition initiale

$$c_0(x) := \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \quad x \in \mathbb{R},$$

TABLE 4.1 – Ordre β de la variance du calcul de $\mathcal{J}$ par les méthodes MC, LHS, MCS et SS

MC	LHS	MCS	SS
1,00	1,00	1,44	1,43

et avec un coefficient de diffusion constant $D = 1$. On se propose de calculer l'intégrale

$$\mathcal{J} := \int_0^a c(x, T) dx,$$

pour $a = 4$ et $T = 1$. La discrétisation temporelle se fait avec un pas de temps $\Delta t = 1/100$.

On compare les résultats obtenus par la méthode MC ordinaire à ceux que l'on trouve en utilisant trois stratégies de stratification : MCS, LHS et SS. Pour estimer les variances des estimateurs, on construit un échantillon de valeurs approchées de $\mathcal{J}$ de taille $M = 5\,000$ puis on calcule leur variance empirique. Les résultats obtenus par la méthode MC classique, la méthode de stratification simple (MCS), celle de l'échantillonnage par hypercubes latins (LHS) présentées au chapitre 2 et la méthode stratifiée Sudoku (SS) décrite précédemment, sont représentés dans la Figure 4.2. Dans ces simulations, le nombre de particules mises en jeu est de la forme $N = (10m)^2$ avec $1 \leq m \leq 20$. Sur la même figure, nous avons comparé les temps de calcul pour les différentes méthodes en fonction du nombre de points de la simulation.

L'efficacité est définie comme l'inverse du produit de la variance par le temps de calcul [44, 76]. Nous avons comparé les efficacités des méthodes MC, LHS, MCS et SS : voir la Figure 4.3. Il apparaît que celle de la méthode SS est la meilleure.

On a aussi comparé ces méthodes à la méthode hasardisée proposée par Owen (OS) [111] et qui consiste à brouiller une suite à faible discrétion en utilisant des permutations affines (voir chapitre 1). La suite à faible discrétion utilisée est la suite de Faure en base $b = 2$ et en dimension 2. Les courbes des variances sont tracées dans la Figure 4.4 en fonction du nombre de points N , $N = 2^5, \dots, 2^{15}$, pour cette méthode. On remarque que la méthode OS fournit la variance la plus petite. Ceci est dû au fait que le brouillage conserve les propriétés de répartition de la suite originale : la suite ainsi obtenue est aussi une suite $(0, 2)$ en base 2.

Si l'on suppose que la variance est de l'ordre de $N^{-\beta}$, on peut estimer la valeur de β en effectuant une régression linéaire. Les ordres des variances des différentes méthodes sont donnés dans la Table 4.1.

Pour la méthode SS, nous retrouvons un ordre de variance proche de l'ordre de $N^{-3/2}$, qui est celui obtenu théoriquement pour le problème de l'intégration numérique en dimension 2, présenté au chapitre 3. Cela permet de penser que la méthode SS est bien une méthode de réduction de la variance.

Supposant que la variance est exprimée par $\mathbf{Var} = cN^{-\beta}$, avec c constante, on remarque un décalage entre les constantes des différentes méthodes. Ceci montre que les constantes diminuent en passant de la méthode MC aux méthodes LHS, MCS, SS et MCO respectivement.

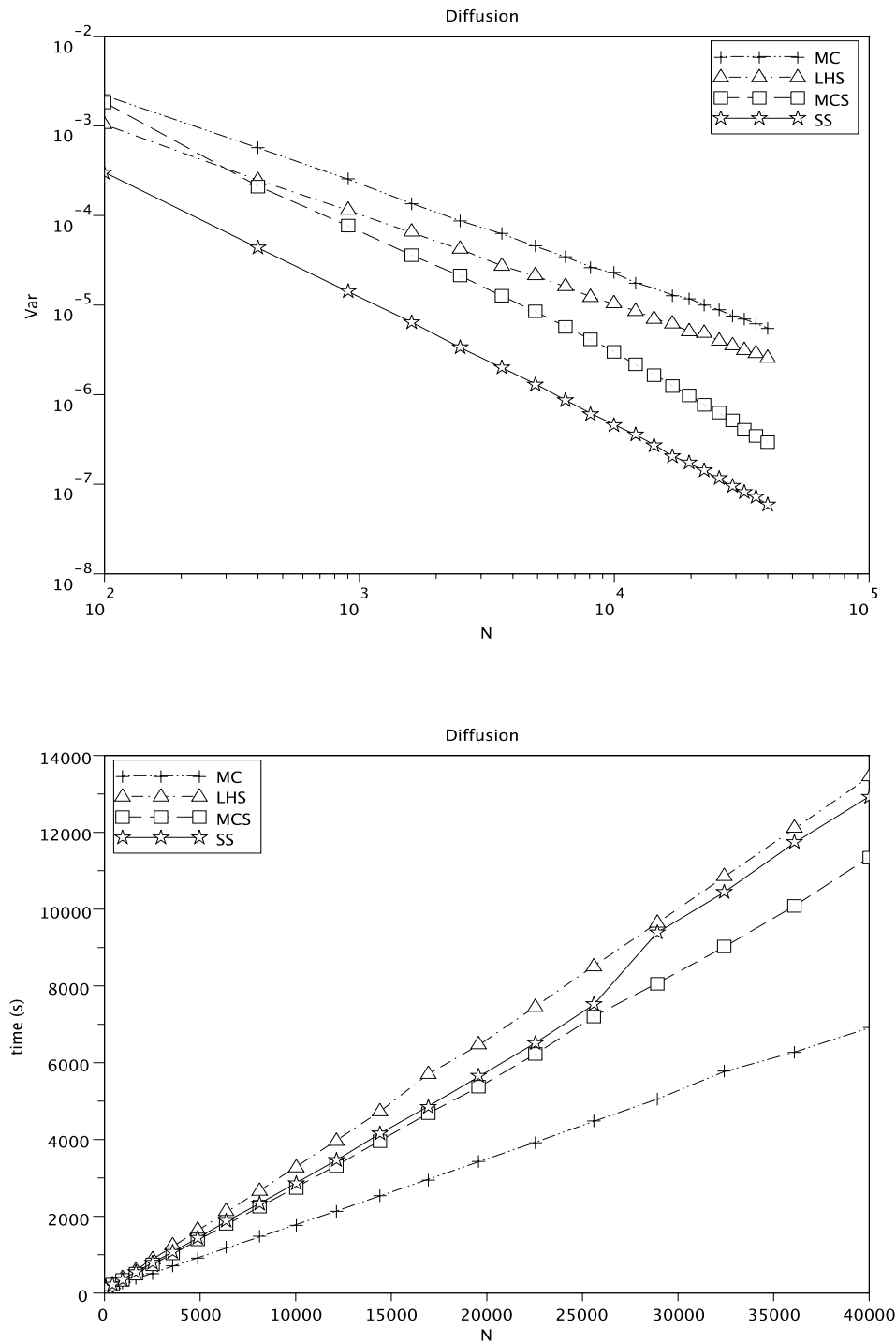


FIGURE 4.2 – Variances (en haut) et temps de calcul (en bas) pour 5000 estimations indépendantes de l'approximation de $\mathcal{J} = \int_0^a c(x, T)dx$ en fonction de N , pour $10^2 \leq N \leq 200^2$. Comparaison des méthodes MC (+), LHS (Δ), MCS ($\square$) et SS ($\star$).

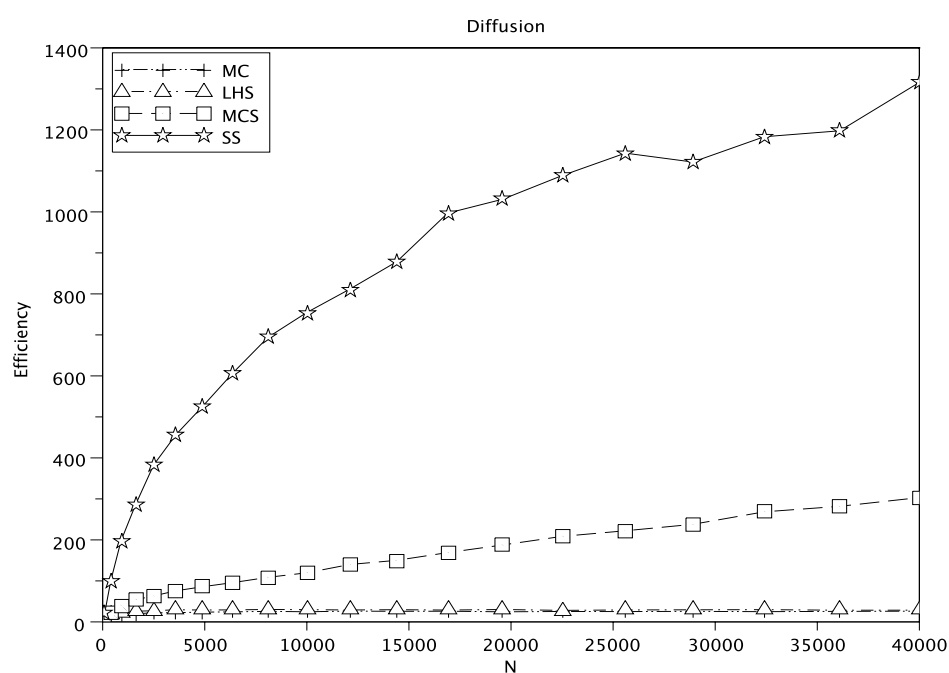


FIGURE 4.3 – Efficacités des méthodes MC (+), LHS (Δ), MCS ($\square$) et SS ($\star$) en fonction du nombre de points N .

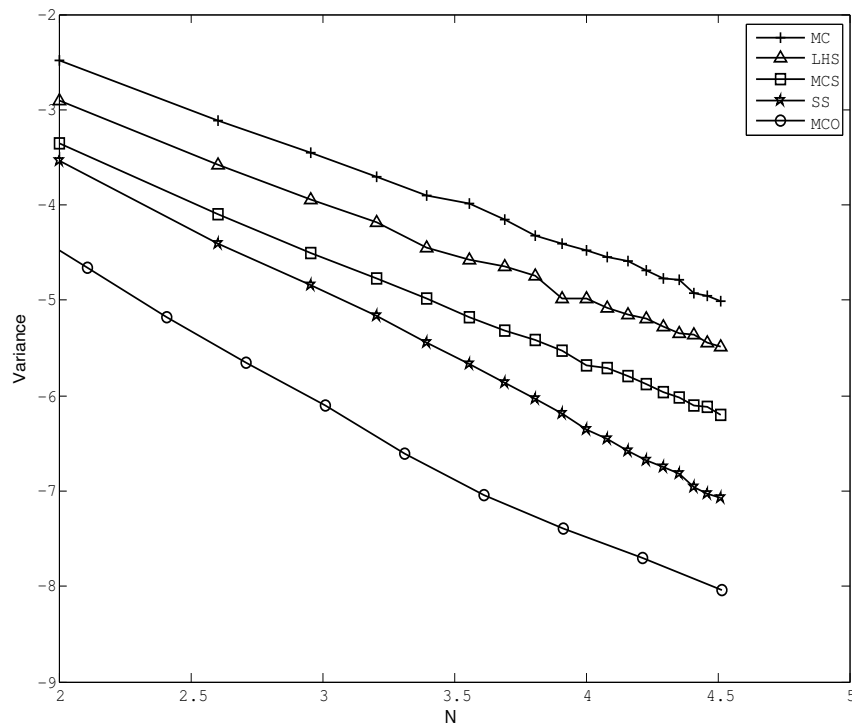


FIGURE 4.4 – Valeurs des variances obtenues en répétant 1 000 fois de manière indépendante le calcul de $\mathcal{J} = \int_0^a c(x, T)dx$ en fonction de N . Comparaison des méthodes MC (+), LHS (Δ), MCS ($\square$), SS ($\star$) et MCO ($\circ$).

Nous avons aussi constaté que l'étape de tri est inutile quand on utilise des nombres aléatoires ordinaires (approche MC). Par ailleurs, si l'on utilise une stratégie de stratification sans trier les particules de simulation, on obtient une variance plus grande que celle de la méthode de Monte Carlo ordinaire (avec un ordre de convergence proche).

Dans la suite, nous montrons que l'approche de stratification SS permet d'améliorer les résultats dans le calcul de la diffusion des ions déjà considérée et s'adapte à des problèmes en milieu hétérogène (coefficient de diffusion non constant).

4.4 Diffusion dans un milieu hétérogène : correction du pas gaussien

On considère à présent un problème de diffusion dans un milieu hétérogène, où le coefficient de diffusion dépend de la variable d'espace : $D = D(x)$. Dans ce cas, un déplacement de chaque particule d'un pas d'amplitude déterminée par la valeur du coefficient de diffusion au point de départ de la particule : $\Delta x := \sqrt{2D(x)\Delta t}Z$ (où Z est une variable aléatoire normale centrée réduite) conduit à des résultats erronés même pour des petites valeurs de Δt . On observe une convection artificielle en direction des régions de faible diffusivité : voir [49]. Cette approche intuitive n'est donc pas valable.

Pour résoudre un problème biologique de diffusion d'ions [87], L. Farnell et W.G. Gibson ont proposé dans [28] une adaptation du schéma de marche aléatoire dans le cas d'un milieu hétérogène qui consiste à introduire un terme correcteur au pas gaussien. Nous reprenons leur méthode avant d'en proposer une variante stratifiée.

Correction du pas gaussien

Soit $D(x) > 0$ un coefficient de diffusion variable dépendant de la position x . Soit x_0 un réel et f_X la densité de la loi gaussienne centrée et de variance $2D(x_0)\Delta t$:

$$f_X(x) = \frac{e^{-x^2/4D(x_0)\Delta t}}{\sqrt{4\pi D(x_0)\Delta t}}.$$

Soit $\Delta x = \sqrt{2D(x_0)\Delta t}Z$ le pas gaussien non corrigé, Z étant une variable aléatoire réelle de loi $\mathcal{N}(0, 1)$. Si U est une variable aléatoire de loi uniforme sur $(0, 1)$, on peut écrire :

$$U = \int_{-\infty}^{\Delta x} f_X(x)dx. \quad (4.4.1)$$

De même, si $f_W(w)$ est la fonction de densité du pas d'espace exact Δw , alors

$$U = \int_{-\infty}^{\Delta w} f_W(w)dw. \quad (4.4.2)$$

L'idée consiste à chercher un terme de correction ϵ tel que :

$$\Delta w = \Delta x + \epsilon. \quad (4.4.3)$$

En se basant sur les équations (4.4.1), (4.4.2) et (4.4.3), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\Delta x} f_X(x)dx &= \int_{-\infty}^{\Delta x} f_W(w)dw + \int_{\Delta x}^{\Delta x+\epsilon} f_W(w)dw \\ &= \int_{-\infty}^{\Delta x} f_W(w)dw + \epsilon f_W(\Delta x) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned}$$

On a donc une expression du terme de correction du premier ordre :

$$\epsilon = \frac{\int_{-\infty}^{\Delta x} f_X(x)dx - \int_{-\infty}^{\Delta x} f_W(w)dw}{f_W(\Delta x)}. \quad (4.4.4)$$

Ce terme n'est pas pratiquement utilisable car la distribution f_W est généralement inconnue. Pour aboutir à une expression utile, on commence par étudier le cas simple d'un coefficient de diffusion linéaire, avant de passer au cas général, où l'on fait un développement de Taylor.

Cas d'un coefficient de diffusion linéaire

On suppose que

$$D(x) = D_0(1 + \alpha x),$$

où $D_0 > 0$ et α sont des constantes. Dans ce cas, pour une émission initiale ponctuelle d'intensité 1 au point 0, qui se traduit par $c_0 = \delta$, la solution de l'équation de diffusion s'écrit :

$$c(x, t) = \frac{1}{D_0|\alpha|t} e^{-(2+\alpha x)/D_0\alpha^2 t} I_0\left(\frac{2\sqrt{1+\alpha x}}{D_0\alpha^2 t}\right), \quad (4.4.5)$$

I_0 étant la fonction de Bessel modifiée [39]. Par suite l'expression exacte de la fonction de densité est :

$$f_W(w) = \frac{1}{D_0|\alpha|\Delta t} e^{-(2+\alpha w)/D_0\alpha^2 \Delta t} I_0\left(\frac{2\sqrt{1+\alpha w}}{D_0\alpha^2 \Delta t}\right).$$

Pour un petit pas de temps Δt et pour $w = \mathcal{O}(\Delta t)$, un développement asymptotique de I_0 au voisinage de $+\infty$ permet d'écrire

$$f_W(w) = \frac{e^{-w^2/4D_0\Delta t}}{\sqrt{4\pi D_0\Delta t}} \left(1 - \frac{\alpha}{4}w + \frac{\alpha}{8D_0\Delta t}w^3 + \mathcal{O}(w^2)\right).$$

En remplaçant dans l'expression (4.4.4) on obtient

$$\epsilon \approx \epsilon_1 := \frac{\frac{\alpha D_0}{2} \Delta t + \frac{\alpha}{4} (\Delta x)^2}{1 - \frac{\alpha}{4} \Delta x + \frac{\alpha}{8D_0\Delta t} (\Delta x)^3}. \quad (4.4.6)$$

Le pas corrigé du déplacement gaussien d'une particule partant de l'origine est alors donné par $\Delta x + \epsilon_1$, où $\Delta x = \sqrt{2D_0\Delta t}Z$, Z étant une variable aléatoire de loi $\mathcal{N}(0, 1)$.

Cas général d'un coefficient variable

Dans ce cas on fait une approximation linéaire de $D(x)$ en utilisant un développement de Taylor :

$$D(x_0 + \Delta x) = D(x_0) \left(1 + \frac{D'(x_0)}{D(x_0)} \Delta x \right) + \mathcal{O}((\Delta x)^2).$$

Pendant un intervalle de temps Δt , une particule en x_0 fera un déplacement d'amplitude $\Delta x + \epsilon$, où

$$\Delta x = \sqrt{2D(x_0)\Delta t}Z, \quad Z \text{ de loi } \mathcal{N}(0, 1), \quad (4.4.7)$$

$$\epsilon = \frac{\frac{D'(x_0)\Delta t}{2} + \frac{D'(x_0)(\Delta x)^2}{4D(x_0)}}{1 - \frac{D'(x_0)\Delta x}{4D(x_0)} + \frac{D'(x_0)(\Delta x)^3}{8(D(x_0))^2\Delta t}}. \quad (4.4.8)$$

On peut écrire

$$D(x) = \widehat{D}s(x),$$

où $\widehat{D}$ est une valeur moyenne du coefficient de diffusion et $s(x)$ est le terme dépendant de x . Soit $\widehat{\Delta x}$ le pas gaussien associé au coefficient de diffusion $\widehat{D}$; il est donné par :

$$\widehat{\Delta x} := \sqrt{2\widehat{D}\Delta t}Z.$$

On réécrit alors les équations (4.4.7) et (4.4.8) sous la forme :

$$\Delta x = \widehat{\Delta x} \sqrt{s(x_0)}, \quad (4.4.9)$$

$$\epsilon = \frac{K(\widehat{\Delta x}) s'(x_0)}{1 + M(\widehat{\Delta x}) s'(x_0)/\sqrt{s(x_0)}}, \quad (4.4.10)$$

où l'on a noté

$$K(\widehat{\Delta x}) := \frac{1}{2}\widehat{D}\Delta t + \frac{1}{4}(\widehat{\Delta x})^2$$

et

$$M(\widehat{\Delta x}) := -\frac{1}{4}\widehat{\Delta x} + \frac{1}{8\widehat{D}\Delta t}(\widehat{\Delta x})^3.$$

4.5 Algorithme de simulation Monte Carlo stratifié en milieu hétérogène

Dans ce paragraphe, nous développons un algorithme pour la simulation de la diffusion dans un milieu hétérogène. Il reprend les étapes principales de celui présenté à la section 4.3 en introduisant le terme correcteur qu'il convient d'ajouter au pas de l'approche naïve. Une approche QMC a été étudiée dans [18, 21].

Soit n un entier naturel et $N = n^2$; soit Δt un pas de temps. On approche la solution de l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right)(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (4.5.1)$$

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.5.2)$$

où $D = D(x)$. Les instants d'observations sont $t_p = p\Delta t$; l'approximation cherchée est de la forme :

$$c^p(x) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^p),$$

où $x_1^p, \dots, x_N^p$ sont des réels à déterminer (les positions des N particules de simulation à l'instant t_p).

L'initialisation se fait comme dans le cas d'un milieu homogène : un ensemble de N réels $\{x_1^0, \dots, x_N^0\}$ échantillonne la distribution initiale c_0 .

On suppose, qu'à l'instant t_p , les particules sont en $x_1^p, \dots, x_N^p$. Leur évolution à l'instant suivant se fait en les ordonnant dans un premier temps puis en effectuant une quadrature de Monte Carlo à l'aide d'un ensemble stratifié Sudoku.

1. Renumérotation des particules. Les particules sont ordonnées selon leurs positions croissantes :

$$x_1^p \leq x_2^p \leq \dots \leq x_N^p.$$

2. Intégration Monte Carlo stratifiée. Soit

$$\mathcal{W} = \{W_\ell = (W_{\ell,1}, W_{\ell,2}) : \ell = (\ell_1, \ell_2), \quad 1 \leq \ell_1, \ell_2 \leq n\} \subset I^2$$

un ensemble stratifié Sudoku. À tout réel $u \in (0, 1)$, on associe l'indice $k(u) := \lfloor Nu \rfloor \in \{0, \dots, N-1\}$.

On définit, pour $x \in \mathbb{R}$ et $u \in (0, 1)$:

- le déplacement

$$f(x, u) = \sqrt{2D(x)\Delta t} \Phi^{-1}(u),$$

- le terme de correction

$$\epsilon(x, u) = \frac{\frac{dD}{dx}(x) \frac{\Delta t}{2} + \frac{dD}{dx}(x) \frac{(f(x, u))^2}{4D(x)}}{1 - \frac{dD}{dx}(x) \frac{f(x, u)}{4D(x)} + \frac{dD}{dx}(x) \frac{(f(x, u))^3}{8(D(x))^2 \Delta t}}.$$

Les positions des particules à l'instant t_{p+1} sont alors définies par :

$$x_{k(W_{\ell,1})}^{p+1} = x_{k(W_{\ell,1})}^p + f(x_{k(W_{\ell,1})}^p, W_{\ell,2}) + \epsilon(x_{k(W_{\ell,1})}^p, W_{\ell,2}),$$

pour $\ell = (\ell_1, \ell_2)$, $1 \leq \ell_1, \ell_2 \leq n$.

Essais numériques

Dans cette partie, nous vérifions la validité de l'algorithme stratifié Sudoku en faisant des expériences numériques. Nous montrons que la technique de stratification approche mieux la solution du problème que le schéma MC classique. Ces essais, repris de [28], portent sur l'étude de la diffusion des ions de calcium dans un milieu biologique dans lequel la source émet périodiquement des groupes de particules à des instants précis [87]. Les mêmes problèmes ont été considérés dans [18, 21]. Nous traitons l'équation de diffusion dans deux cas :

1. le coefficient de diffusion est constant ;
2. le coefficient de diffusion varie en fonction de la position.

Dans le premier cas, nous pouvons comparer les résultats à la solution exacte ; dans le second, la solution de référence est obtenue par un schéma de MC fin (avec un grand nombre de particules). Nous estimons l'évolution de la concentration c des ions dans différentes régions de l'espace. La concentration est calculée en faisant le quotient du nombre de particules dans la région par le nombre total de particules émises. Dans nos essais numériques, nous considérons l'émission de particules par une source ; cette émission est exactement représentée par le schéma (sans approximation numérique).

Coefficient de diffusion constant

Nous représentons les courbes d'évolution de la concentration dans différents intervalles. Nous considérons trois émissions successives de particules. La période des instants d'émission est égale à 10. Le temps final est $T = 30$ et le nombre de pas de temps est $P = 187\,500$ (soit 62 500 pas de temps par période), donc $\Delta t := T/P = 1,6 \cdot 10^{-4}$.

Le nombre de particules libérées durant chaque période d'émission est $N = 2^{12}$. Afin de diminuer la fluctuations des courbes, nous faisons des moyennes sur des intervalles temporels d'amplitude 0,16. Nous comparons les résultats des méthodes MC et Monte Carlo stratifié Sudoku (SS). Pour les simulations SS, les groupes de N particules évoluent séparément. L'évolution de la concentration des ions est calculée dans les intervalles : $[40, 60]$, $[100, 120]$, $[160, 180]$ et $[180, 200]$, dans un milieu où le coefficient de diffusion est $D = 4\,000$. Les résultats des simulations sont représentés dans les Figures 4.5 et 4.6.

Nous constatons que la méthode SS atténue nettement les oscillations des résultats en comparaison avec les calculs MC. Les précisions atteintes sont presque inaccessibles à une méthode MC standard avec le même nombre de particules de simulation.

Coefficient de diffusion variable

Nous considérons le coefficient de diffusion variable suivant :

$$D(x) = D_0(1 - 0.8u(x)),$$

avec $D_0 = 4\,000$ et

$$u(x) := \frac{1}{2}(\tanh(A(b - x)) + 1), \quad A = 0,035 \quad \text{et} \quad b = 200.$$

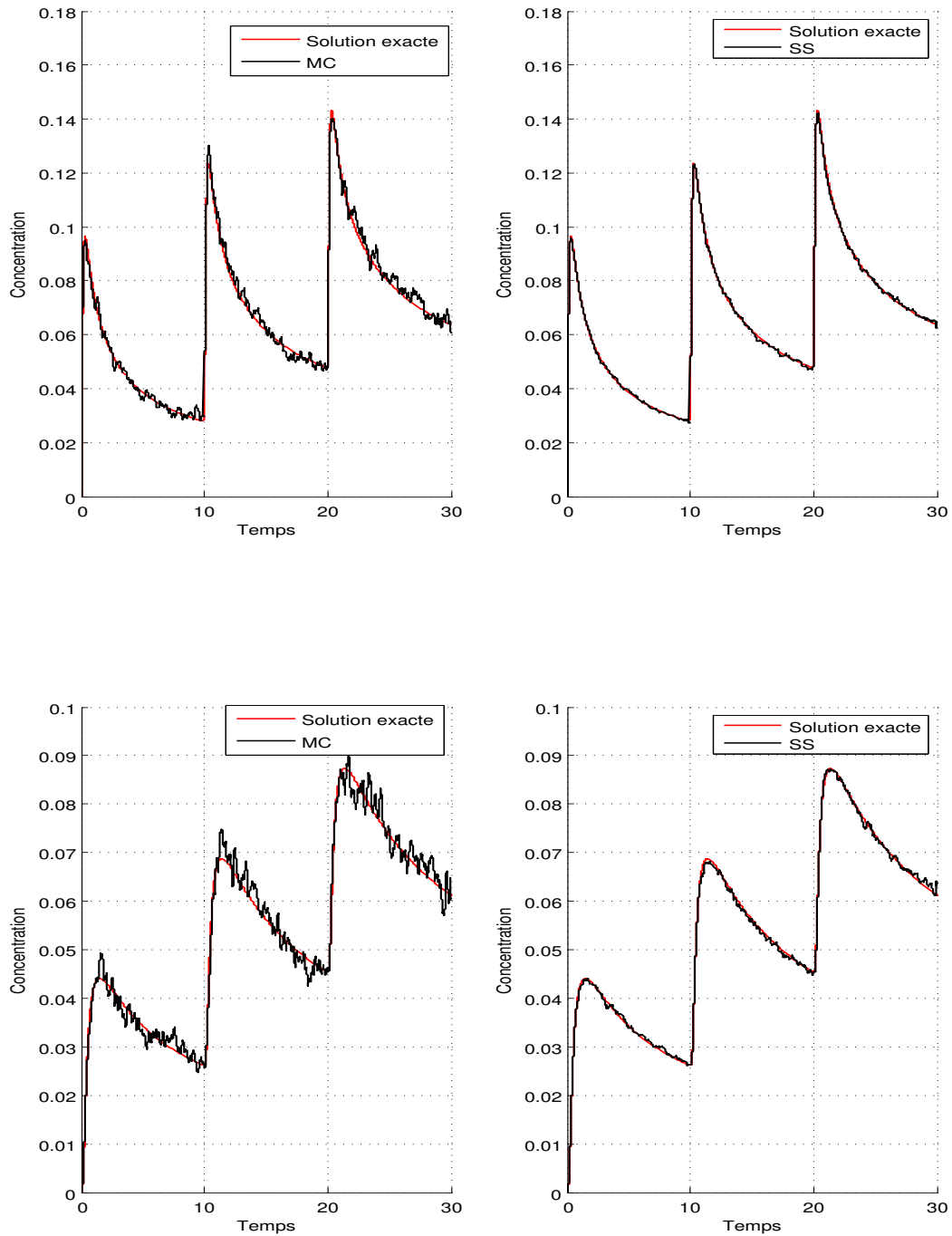


FIGURE 4.5 – Coefficient de diffusion constant. Évolution de la concentration dans les intervalles $[40, 60]$ (en haut) et $[100, 120]$ (en bas) par les méthodes MC (à gauche) et SS (à droite)

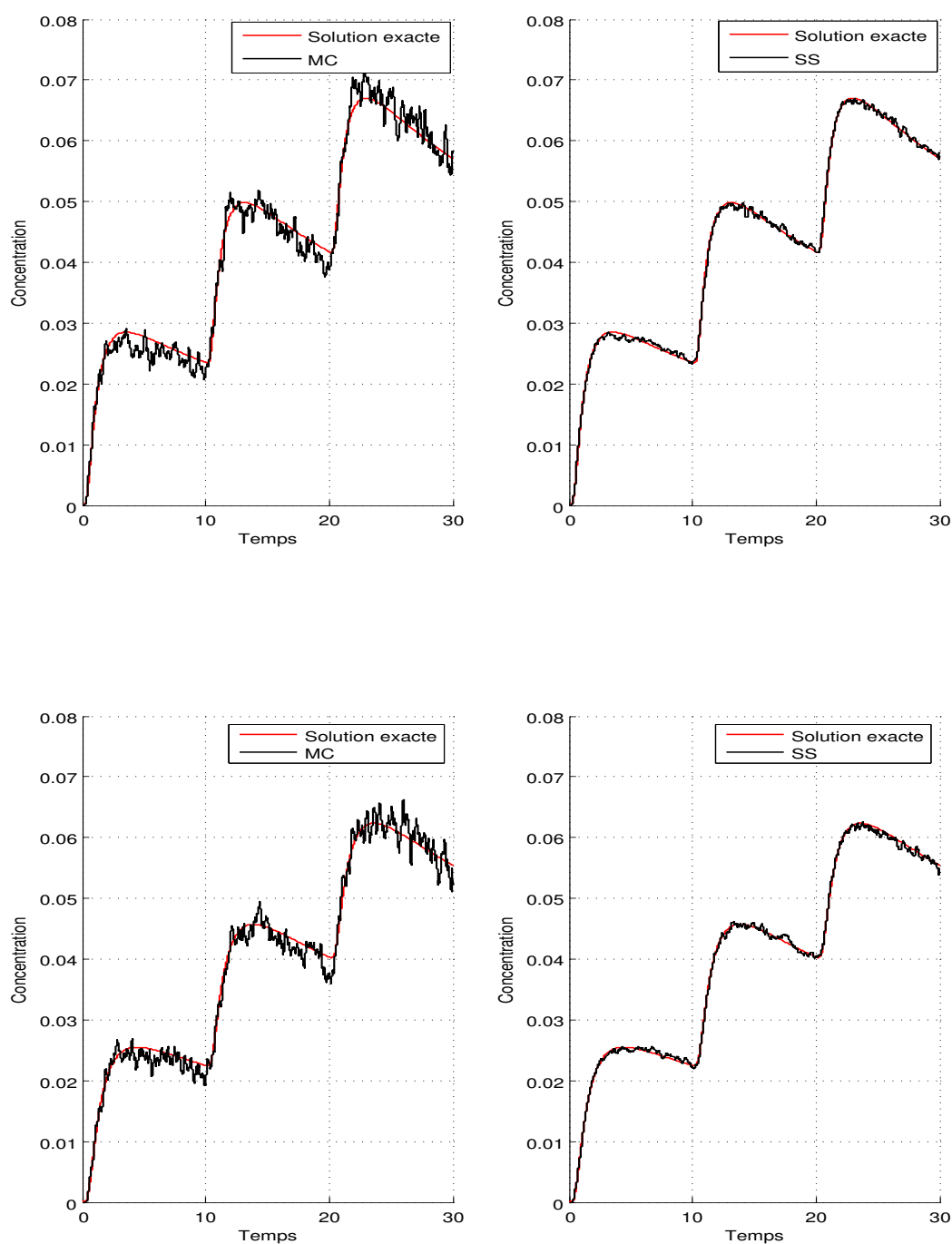


FIGURE 4.6 – Coefficient de diffusion constant. Évolution de la concentration dans les intervalles $[160, 180]$ (en haut) et $[180, 200]$ (en bas) par les méthodes MC (à gauche) et SS (à droite)

Nous conservons les mêmes paramètres que dans les exemples précédents et nous calculons la concentration des particules dans les intervalles : $[40, 60]$, $[100, 120]$, $[160, 180]$ et $[180, 200]$. Dans ces simulations, un terme de correction est utilisé pour déplacer chaque particule. La solution exacte n'a pas de forme explicite connue, c'est pourquoi nous comparons les résultats avec la solution approchée fournie par une méthode de Monte Carlo fine qui utilise 2^{20} particules.

Les résultats des calculs dans les intervalles $[40, 60]$ et $[100, 120]$ sont représentés dans la Figure 4.7 et ceux dans les intervalles $[160, 180]$ et $[180, 200]$ sont reportés dans la Figure 4.8.

Dans ce cas, on remarque une déviation considérable des résultats du calcul MC par rapport à la courbe de référence qui devient de plus en plus importante au cours du temps, alors que la méthode SS réduit nettement les oscillations des résultats.

Une étape importante dans l'algorithme stratifié proposé est le tri des particules de la simulation à chaque pas de temps. Des essais numériques, dont les résultats ne sont pas reportés ici, ont montré que l'utilisation de la technique de stratification sans renuméroter les particules donne des variances supérieures à celles de la méthode MC, avec un ordre de convergence de N^{-1} . La méthode perd donc son efficacité, pour la même raison que dans le paragraphe précédent : l'amplitude des sauts des fonctions que l'on intègre n'est pas minimisée.

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons proposé un schéma de Monte Carlo stratifié pour la simulation de l'équation de diffusion. Ce schéma initialement mis au point pour un coefficient de diffusion constant peut aussi être utilisé dans le cas d'un milieu hétérogène, à coefficient de diffusion non constant, à condition d'introduire un terme correcteur dans les déplacements aléatoires des particules. Les essais numériques ont montré que cette technique améliore considérablement les résultats obtenus par un schéma MC classique.

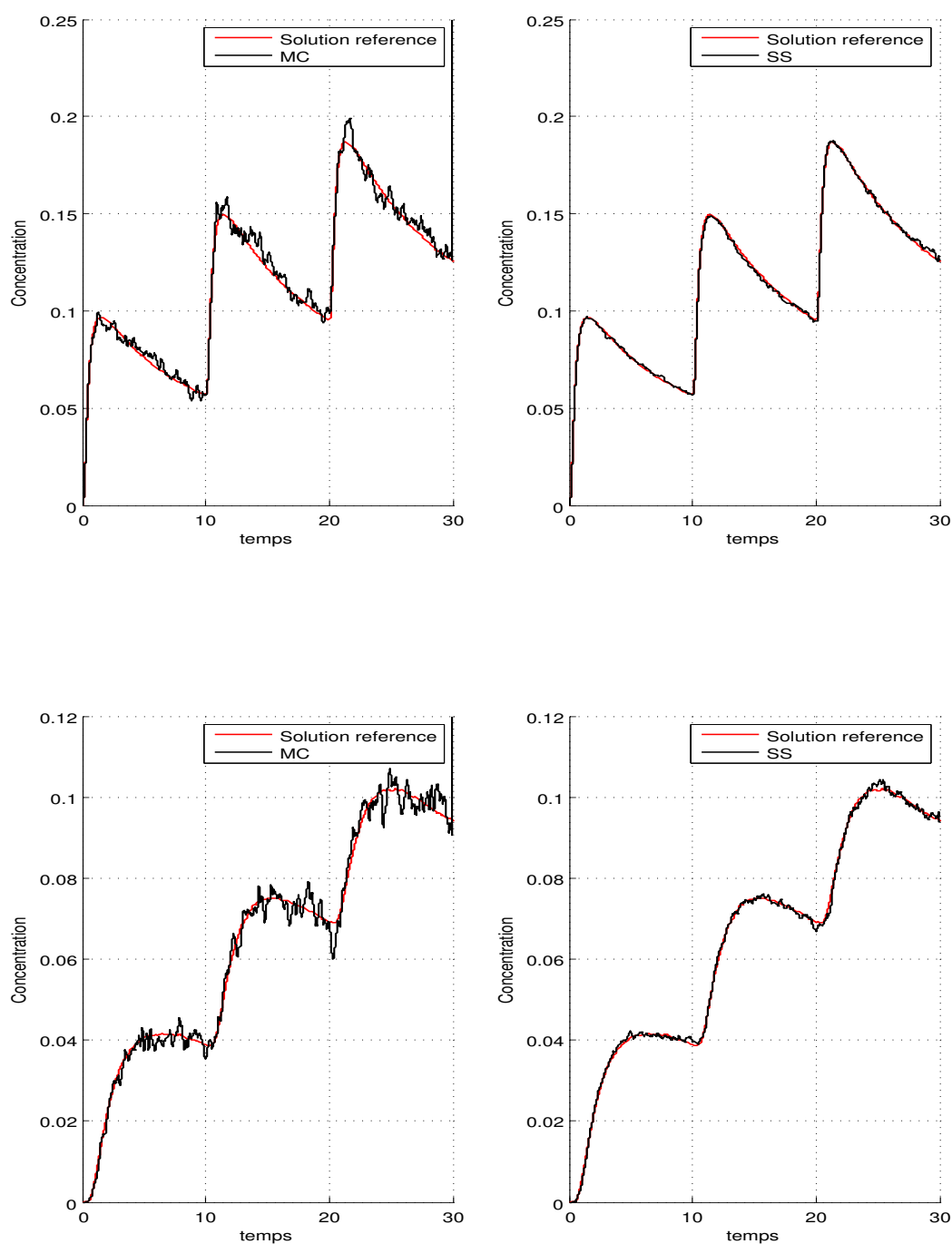


FIGURE 4.7 – Coefficient de diffusion variable. Évolution de la concentration dans les intervalles $[40, 60]$ (en haut) et $[100, 120]$ (en bas) par les méthodes MC (à gauche) et SS (à droite)

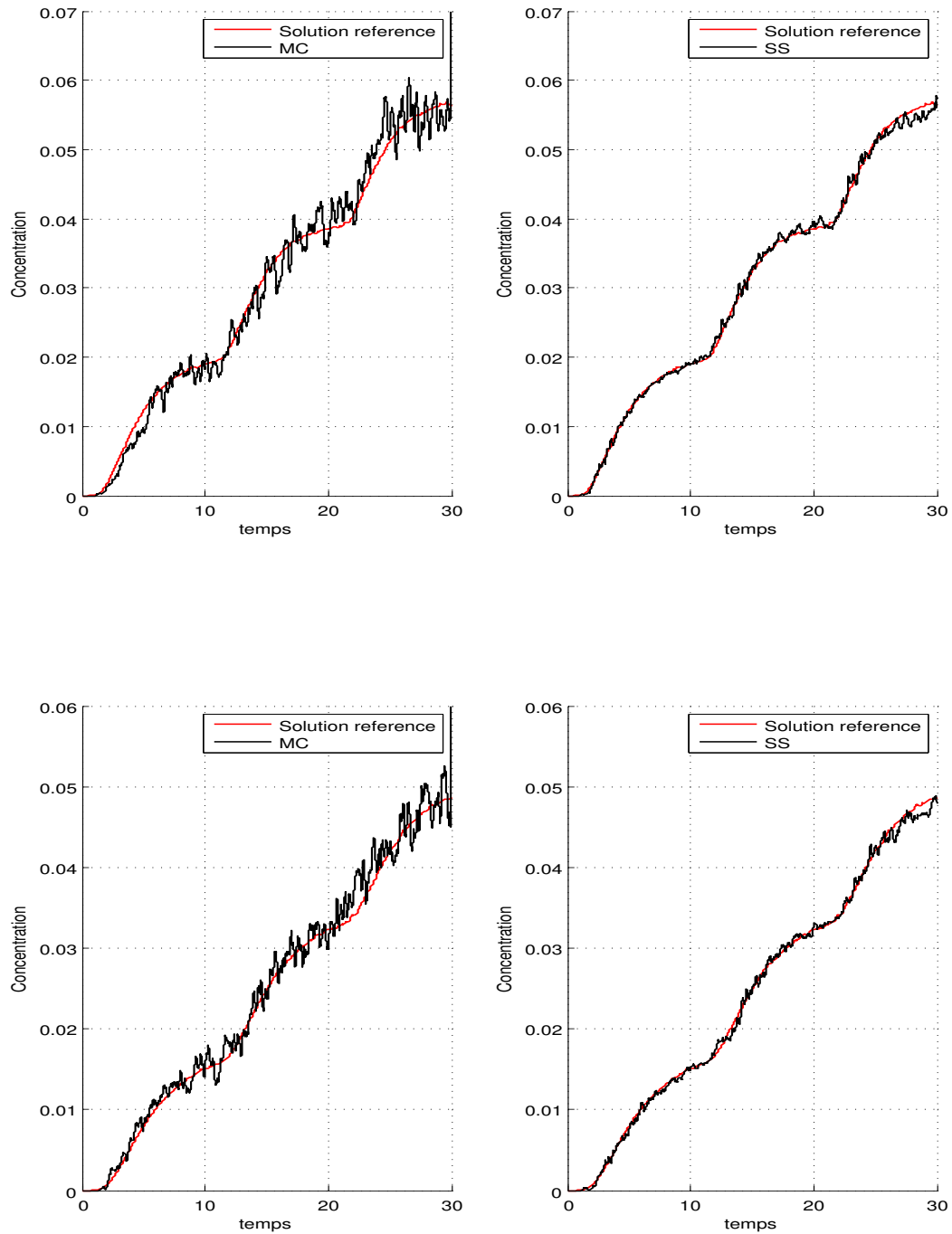


FIGURE 4.8 – Coefficient de diffusion variable. Évolution de la concentration dans les intervalles $[160, 180]$ (en haut) et $[180, 200]$ (en bas) par les méthodes MC (à gauche) et SS (à droite)

Chapitre 5

Simulation de la coagulation par la méthode stratifiée Sudoku

5.1 Introduction

La coagulation est le processus d'adhésion ou de fusion de particules entre elles, après qu'elles soient entrées en contact. Ce contact peut être dû à un mouvement aléatoire des particules ou causé par différentes forces internes moléculaires ou d'attraction (magnétique ou électrique) qui existent entre ces particules. En plus du processus de coagulation, le nombre et la taille des particules peuvent évoluer sous l'effet de plusieurs phénomènes tels que la nucléation, la condensation, la fragmentation et la déposition.

Les modèles de coagulation apparaissent dans les domaines des sciences et technologies comme l'étude des aérosols et des polymères réactifs et en ingénierie chimique, notamment dans la formation des sprays. Les sprays sont des fluides produits par l'éjection de gouttes de liquide dans un milieu gazeux, par des dispositifs appelés atomiseurs. Ils sont utilisés dans un grand nombre de processus industriels : bio-technologies, pharmacie, impression par jet d'encre, peinture, fabrication de piles à combustible. L'efficacité de l'atomisation dépend des caractéristiques de pulvérisation, parmi lesquelles la taille des gouttes éjectées constitue une des plus importantes caractéristiques du spray. Une méthode classique de modélisation de la distribution des tailles des gouttes est empirique : étant donnée une collection de distributions standards, on trouve une forme qui s'adapte aux données collectées pour une série d'atomiseurs. Cette approche est indépendante du temps, mais la distribution des tailles des gouttes peut changer suite à un choc ou une fusion entre des gouttes du spray.

La modélisation de la coagulation a commencé avec les travaux de von Smoluchowski [118, 119]. Il a proposé de la représenter par une infinité d'équations différentielles, qui décrivent l'évolution de la taille des particules (supposée discrète). L'article de Müller [93] étend le travail précédent en considérant une distribution continue des tailles, ce qui conduit à une modélisation par une équation intégral-différentielle. S'il existe des méthodes déterministes de résolution de ces équations [32], la part des méthodes de Monte Carlo est importante [116, 51, 52, 4, 17, 11].

Dans ce chapitre un algorithme de simulation de l'équation de coagulation est présenté. Il suit les étapes principales de celui de Babovsky [4] (lui-même inspiré du schéma de

Nanbu [94] pour l'équation de Botzmann des gaz raréfiés) : la densité initiale de masse est approchée par une somme de mesures de Dirac, le temps est discrétisé et à chaque pas de temps, une simulation numérique de la coagulation est effectuée. Les tailles des particules évoluent selon la dynamique décrite par le système d'équations différentielles de Smoluchowski [118, 119] dans le cas discret ou par une équation intégro-différentielle [93] dans le cas continu ; dans les deux cas on utilise un ensemble de points stratifié Sudoku. Une rénumérotation des particules est essentielle à chaque étape de la simulation. Nous appelons cette méthode *SS*. Des essais numériques montrent que les résultats obtenus par cet algorithme sont plus précis que ceux obtenus par une méthode de Monte Carlo classique, cela dans les deux cas discret et continu. L'avantage de la simulation *SS* est de pouvoir garder constant le nombre de particules numériques pendant la simulation (ce qui n'est pas le cas des méthodes de [116, 51, 52]), avec un taux de convergence meilleur que celui de la méthode de [4].

Nous présentons d'abord l'équation de coagulation discrète et son schéma de simulation numérique de type *SS*. Nous testons cette méthode par des essais numériques pour des données initiales particulières. Nous proposons ensuite un algorithme de simulation de l'équation de coagulation continue et il est également validé par des tests numériques. Une partie des résultats de ce chapitre a été publiée dans [22].

5.2 Algorithme MC stratifié Sudoku pour l'équation de coagulation discrète

La modélisation des processus de coagulation a été abordée pour la première fois en 1916 par Smoluchowski dans ses ouvrages sur la coagulation des colloïdes [118, 119]. Il a considéré l'évolution d'un système de particules de tailles discrètes $i = 1, 2, 3, \dots$ (la masse d'une particule étant supposée proportionnelle à sa taille) qui interagissent par coagulation. On désigne par $c(i, t)$ la concentration des particules de taille i à l'instant t . Le nombre total de particules à l'instant initial est noté N_0 et le nombre de particules de taille i à l'instant t est $N_0 c(i, t)$. La rapidité du phénomène de coagulation est modélisée par un noyau de coagulation $K(i, j)$ qui exprime le taux (ou la probabilité) de coagulation entre une particule de masse i et une autre de masse j , pour former une particule de masse $i + j$.

La concentration c est solution du système d'équations différentielles :

$$\frac{\partial c}{\partial t}(i, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(i-j, j) c(i-j, t) c(j, t) - \sum_{j=1}^{\infty} K(i, j) c(i, t) c(j, t), \quad i \in \mathbb{N}^*, \quad t > 0, \quad (5.2.1)$$

qui décrit l'évolution, en fonction du temps, de la densité $c(i, t)$ du nombre de particules de taille i à l'instant t .

Nous supposons que les données initiales satisfont :

$$c(i, 0) = c_0(i) \geq 0, \quad i \geq 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i \geq 1} c(i, 0) = 1. \quad (5.2.2)$$

Nous supposons dans la suite que le noyau de coagulation $K(i, j)$ est positif et symétrique

$$K(i, j) = K(j, i) \geq 0, \quad i, j \geq 1.$$

À chaque instant, la concentration $c(i, t)$ des particules de masse i peut :

- augmenter par coagulation de deux particules de tailles $i - j$ et $j < i$.
- diminuer par coagulation d'une particule de taille i avec d'autres particules.

En multipliant l'équation (5.2.1) par i et en sommant sur $i \in \mathbb{N}^*$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{\infty} ic(i, t) \right) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{i-1} (i - j + j) K(i - j, j) c(i - j, t) c(j, t) \\ &\quad - \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} i K(i, j) c(i, t) c(j, t), \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{\infty} ic(i, t) \right) &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{i-1} (i - j) K(i - j, j) c(i - j, t) c(j, t) - \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} i K(i, j) c(i, t) c(j, t) \\ &= \sum_{h=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} h K(h, j) c(h, t) c(j, t) - \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} i K(i, j) c(i, t) c(j, t) = 0. \end{aligned}$$

Cela exprime la *conservation de la masse* $\sum_{i=1}^{\infty} ic(i, t)$ du système. Une approche intuitive de simulation MC consiste à considérer un grand nombre de particules numériques qui évoluent comme les particules physiques et peuvent donc coaguler selon la dynamique de l'équation. Un désavantage de cette méthode est qu'au cours de la simulation, le nombre de particules diminue à cause de la coagulation, ce qui détériore la convergence du schéma. L'injection de nouvelles particules de simulation s'avère alors nécessaire pour résoudre ce problème [116]. L'approche de [4] permet de garder un nombre de particules constant.

On note

$$C_1 := \sum_{i \geq 1} ic(i, 0)$$

et on change la fonction inconnue

$$f(i, t) := \frac{ic(i, t)}{C_1}.$$

Alors

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t}(i, t) &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} (i - j + j) \frac{1}{C_1} K(i - j, j) c(i - j, t) c(j, t) - \sum_{j=1}^{\infty} i \frac{1}{C_1} K(i, j) c(i, t) c(j, t) \\ &= \sum_{j=1}^{i-1} C_1 K(i - j, j) f(i - j, t) \frac{f(j, t)}{j} - \sum_{j=1}^{\infty} C_1 K(i, j) f(i, t) \frac{f(j, t)}{j}. \end{aligned}$$

On pose

$$\tilde{K}(i, j) := \frac{C_1 K(i, j)}{j},$$

Ces changements conduisent à approcher la *densité de masse* $f(i, t)$ au lieu de la densité du nombre des particules $c(i, t)$, c'est-à-dire à résoudre l'équation :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(i, t) = \sum_{j=1}^{i-1} \tilde{K}(i-j, j) f(i-j, t) f(j, t) - \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{K}(i, j) f(i, t) f(j, t). \quad (5.2.3)$$

Pour tout sous-ensemble E de $\mathbb{N}^* := \{1, 2, 3, \dots\}$, on note s_E la suite définie par :

$$s_E(i) = \begin{cases} 1 & \text{si } i \in E, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

En multipliant l'équation (5.2.3) par $s_E(i)$ et en sommant sur $i \in \mathbb{N}^*$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{i \geq 1} f(i, t) s_E(i) &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{i-1} \tilde{K}(i-j, j) f(i-j, t) f(j, t) s_E(i) \\ &\quad - \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{K}(i, j) f(i, t) f(j, t) s_E(i) \\ &= \sum_{h=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{K}(h, j) f(h, t) f(j, t) s_E(h+j) \\ &\quad - \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{K}(i, j) f(i, t) f(j, t) s_E(i) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{K}(i, j) f(i, t) f(j, t) (s_E(i+j) - s_E(i)), \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

pour tout $E \subset \mathbb{N}^*$.

On note f_0 la densité de masse initiale. L'égalité

$$\sum_{i=1}^{\infty} f_0(i) = 1$$

implique

$$\sum_{i=1}^{\infty} f(i, t) = 1, \quad t \geq 0.$$

Un schéma de Monte Carlo de résolution de l'équation (5.2.3) a été proposé dans [4]. La démonstration de sa convergence est également fournie dans [123]. Plus tard, Lécot et Wagner en ont donné une version quasi-Monte Carlo dans [74]. Nous rappelons plus loin un résultat de convergence pour cette approche.

5.2.1 Description du schéma

Nous proposons ici un schéma stratifié Sudoku pour la simulation numérique de (5.2.3) ; il comporte plusieurs étapes que nous abordons successivement.

Initialisation des particules

On considère un entier $n \geq 1$ et on note $N := n^3$. La première étape de l'algorithme consiste à choisir un ensemble de N particules

$$J^0 := \{j_1^0, \dots, j_N^0\}$$

qui échantillonnent la distribution initiale f_0 , c'est-à-dire telles que

$$f^0 := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta_{j_k^0} \approx f_0.$$

où δ_j est la mesure de Dirac au point j définie par :

$$\delta_j(i) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ici, le nombre de particules de simulation de même valeur j_k^0 représente non pas le nombre de particules de masse j_k^0 , mais la masse totale des particules de masse j_k^0 dans le système.

Dans le cas d'une distribution initiale ponctuelle

$$f_0(1) = 1, \quad f_0(2) = f_0(3) = \dots = 0,$$

l'initialisation se fait en prenant :

$$j_1^0 = \dots = j_N^0 = 1.$$

Évolution des tailles des particules

On suppose dans la suite que le noyau $\tilde{K}$ est borné et on note

$$\tilde{K}^\infty := \sup_{i,j \geq 1} \tilde{K}(i, j).$$

L'algorithme proposé reste valable pour les noyaux de coagulation non bornés comme le montrent les essais numériques de la section 5.2.2 : on adapte le pas de temps. On choisit un pas de temps fixe Δt vérifiant

$$\Delta t \tilde{K}^\infty < 1.$$

Pour tout entier p , on pose $t_p := p\Delta t$ et $f_p(i) := f(i, t_p)$.

Supposons qu'à l'instant t_p soit déjà construit un ensemble

$$J^p = \{j_1^p, \dots, j_N^p\}$$

tel que

$$f^p := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta_{j_k^p} \approx f_p. \tag{5.2.5}$$

L'approximation de la solution à l'instant t_{p+1} se fait en deux étapes :

1. *Renumérotation des particules.* On effectue un tri des particules de l'instant t_p selon leurs tailles croissantes :

$$j_1^p \leq j_2^p \leq \dots \leq j_N^p.$$

Cette renumérotation est essentielle pour la convergence de la méthode. En effet, l'algorithme peut être décrit, à chaque étape, par une suite d'intégrations numériques et le tri vise à minimiser l'amplitude des sauts des fonctions à intégrer.

Ce type de tri a déjà été utilisé pour la simulation de la diffusion au chapitre 4. Dans le contexte de la coagulation, il a été employé pour la résolution QMC de l'équation de coagulation discète [74].

2. *Intégration numérique.* On discrétise l'équation (5.2.4) à l'aide d'un schéma d'Euler explicite et on définit une mesure transitoire g^{p+1} par :

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{i=1}^{\infty} g^{p+1}(i) s_E(i) - \sum_{i=1}^{\infty} f^p(i) s_E(i) \right) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{K}(i, j) f^p(i) f^p(j) (s_E(i+j) - s_E(i)),$$

pour tout $E \subset \mathbb{N}^*$.

En remplaçant f^p par son expression, on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\infty} g^{p+1}(i) s_E(i) &= \frac{1}{N} \sum_{k_1=1}^N \left(1 - \frac{\Delta t}{N} \sum_{k_2=1}^N \tilde{K}(j_{k_1}^p, j_{k_2}^p) \right) s_E(j_{k_1}^p) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{N^2} \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N \tilde{K}(j_{k_1}^p, j_{k_2}^p) s_E(j_{k_1}^p + j_{k_2}^p). \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

L'approximation g^{p+1} de f_{p+1} n'est pas une somme de masses de Dirac. Pour retrouver une approximation de cette forme, on va effectuer une intégration de type Monte Carlo stratifié. Pour cela, on commence par écrire le membre de droite de l'équation (5.2.6) sous forme de l'intégrale d'une fonction indicatrice $\Gamma_E^{p+1}(u)$ d'un sous ensemble de $I^3 = [0, 1]^3$.

Soit $\mathbf{1}_{k_1, k_2}$ la fonction indicatrice de

$$\left[\frac{k_1 - 1}{N}, \frac{k_1}{N} \right) \times \left[\frac{k_2 - 1}{N}, \frac{k_2}{N} \right)$$

et I_{k_1, k_2}^p la fonction indicatrice de

$$[0, \Delta t \tilde{K}(j_{k_1}^p, j_{k_2}^p)).$$

Pour tout $E \subset \mathbb{N}^*$, on note

$$\Gamma_E^{p+1}(u) := \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N \mathbf{1}_{k_1, k_2}(u_1, u_2) \left(\left(1 - I_{k_1, k_2}^p(u_3) \right) s_E(j_{k_1}^p) + I_{k_1, k_2}^p(u_3) s_E(j_{k_1}^p + j_{k_2}^p) \right),$$

pour $u = (u_1, u_2, u_3) \in I^3$. L'équation (5.2.6) s'écrit alors

$$\sum_{i \geq 1} g^{p+1}(i) s_E(i) = \int_{I^3} \Gamma_E^{p+1}(u) du. \quad (5.2.7)$$

On considère un ensemble de points stratifié Sudoku :

$$\mathcal{W} = \{W_\ell : \ell = (\ell_1, \ell_2, \ell_3), 1 \leq \ell_1, \ell_2, \ell_3 \leq n\}$$

défini par

$$W_\ell = (W_{\ell,1}, W_{\ell,2}, W_{\ell,3}) := \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma^1(\ell_2, \ell_3) - 1}{n^3} + \frac{\xi_\ell^1}{n^3}, \right. \\ \left. \frac{\ell_2 - 1}{n} + \frac{\sigma^2(\ell_1, \ell_3) - 1}{n^3} + \frac{\xi_\ell^2}{n^3}, \frac{\ell_3 - 1}{n} + \frac{\sigma^3(\ell_1, \ell_2) - 1}{n^3} + \frac{\xi_\ell^3}{n^3} \right),$$

où σ^1, σ^2 et σ^3 sont des bijections aléatoires de $\{1, \dots, n\}^2$ dans $\{1, \dots, n^2\}$ et $\xi_\ell^1, \xi_\ell^2, \xi_\ell^3$ sont des variables aléatoires uniformément distribuées sur I . Toutes ces variables aléatoires sont supposées indépendantes. Cet ensemble vérifie les deux propriétés d'uniformité suivantes :

(P1) il y a un point unique de l'ensemble dans chaque intervalle de la forme

$$\left[\frac{\ell_1 - 1}{n}, \frac{\ell_1}{n} \right) \times \left[\frac{\ell_2 - 1}{n}, \frac{\ell_2}{n} \right) \times \left[\frac{\ell_3 - 1}{n}, \frac{\ell_3}{n} \right),$$

pour $1 \leq \ell_1 \leq n, 1 \leq \ell_2 \leq n, 1 \leq \ell_3 \leq n$;

(P2) il y a un point unique de l'ensemble dans chaque intervalle de la forme

$$I^2 \times \left[\frac{k - 1}{n^3}, \frac{k}{n^3} \right), \quad I \times \left[\frac{k - 1}{n^3}, \frac{k}{n^3} \right) \times I, \quad \left[\frac{k - 1}{n^3}, \frac{k}{n^3} \right) \times I^2.$$

pour $1 \leq k \leq n^3$.

En effectuant une quadrature dans le membre de droite de (5.2.7) à l'aide de l'ensemble $\mathcal{W}$, l'approximation f^{p+1} est déterminée par :

$$\forall E \subset \mathbb{N}^* \quad \sum_{i \geq 1} f^{p+1}(i) s_E(i) = \frac{1}{N} \sum_{\ell} \Gamma_E^{p+1}(W_\ell).$$

À chaque pas de temps, un nouvel ensemble de points stratifié Sudoku indépendant des précédents est utilisé.

À $u \in I$, on associe l'indice

$$k(u) := \lfloor Nu \rfloor.$$

Les tailles des particules à l'étape $p + 1$ sont alors définies par :

$$j_{k(W_{\ell,1})}^{p+1} = \begin{cases} j_{k(W_{\ell,1})}^p + j_{k(W_{\ell,2})}^p & \text{si } W_{\ell,3} < \Delta t \tilde{K}(j_{k(W_{\ell,1})}^p, j_{k(W_{\ell,2})}^p), \\ j_{k(W_{\ell,1})}^p & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.2.8)$$

pour tout $\ell = (\ell_1, \ell_2, \ell_3)$, avec $1 \leq \ell_1 \leq n, 1 \leq \ell_2 \leq n, 1 \leq \ell_3 \leq n$. Les composantes $W_{\ell,1}$ et $W_{\ell,2}$ des points permettent de sélectionner les particules à l'instant t_p : la particule d'indice $k(W_{\ell,1})$ peut coaguler avec la particule d'indice $k(W_{\ell,2})$ avec une probabilité de coagulation

$$P_c := \Delta t \tilde{K}(j_{k(W_{\ell,1})}^p, j_{k(W_{\ell,2})}^p).$$

La troisième composante $W_{\ell,3}$ est utilisée pour déterminer un événement :

- si $0 < W_{\ell,3} \leq P_c$, les deux particules fusionnent pour former une particule de masse $j_{k(W_{\ell,1})}^p + j_{k(W_{\ell,2})}^p$;
- si $P_c < W_{\ell,3} < 1$, il n'y a pas de coagulation.

Remarquons que les propriétés de répartition de l'ensemble stratifié Sudoku assurent que chaque particule sera considérée une fois comme particule *primaire* et une fois comme particule *partenaire* et cela à chaque pas de temps.

L'approche Monte Carlo consiste à prendre un système de particules qui interagissent et forment des particules plus grandes en fonction de la dynamique décrite par l'équation de coagulation. À chaque pas de temps et pour chaque particule, un partenaire de coagulation est choisi de manière aléatoire dans l'ensemble des particules et une variable aléatoire de loi uniforme dans $(0, 1)$ est utilisée pour déterminer si la coagulation a lieu ou non. Dans cette approche, aucun tri des particules n'est effectué. Plus précisément, la détermination des tailles des particules à partir des tailles précédentes se fait par :

$$j_k^{p+1} = \begin{cases} j_k^p + j_{L_k}^p & \text{si } U_k < \Delta t \tilde{K}(j_k^p, j_{L_k}^p), \\ j_k^p & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $L_1, \dots, L_N$ sont des variables aléatoires indépendantes uniformément distribuées dans $\{1, 2, \dots, N\}$ et $U_1, \dots, U_N$ sont des variables aléatoires indépendantes uniformément distribuées dans $[0, 1]$. Les variables $\{L_k, U_k : 1 \leq k \leq N\}$ sont supposées indépendantes.

Un algorithme QMC a été proposé dans [74], où une borne d'erreur théorique est prouvée. Pour des entiers $b \geq 2$ et $m \geq 1$ on pose $N := b^m$ le nombre de particules. Soit $X = \{x_0, x_1, \dots\} \subset I^3$ une suite à faible discrédance ; on suppose que X est une suite- $(t, 3)$ en base b pour $t \geq 0$ (voir [96, 98]). On note

- $X^p = \{x_q : pN \leq q < (p+1)N\}$;
- π' la projection définie par $\pi'(x_1, x_2, x_3) := (x_1, x_2)$.

On suppose que l'ensemble des points $\pi'(X^p)$ est un réseau- $(0, m, 2)$ en base b .

Soit $J^0 := \{j_1^0, j_2^0, \dots, j_N^0\}$ un ensemble de particules tel que la densité f_0 soit approchée par la somme de mesures de Dirac

$$f^0 := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta_{j_k^0} \simeq f_0.$$

Soit J^p l'ensemble de particules à l'instant t_p , obtenu en faisant des quadratures quasi-Monte Carlo dans l'algorithme précédent : on remplace les ensembles de points stratifiés Sudoku $\mathcal{W}$ par les segments X^p de la suite X . La notion de variation inférieure est l'analogue de la variation au sens de Hardy et Krause pour des suites à ensemble d'indices multi-dimensionnels. La discrédance à l'origine par rapport à une suite de termes positifs de somme 1 est une variante de la discrédance à l'origine (par rapport à la mesure de Lebesgue). Le résultat suivant est établi dans [74],

Proposition 5.1 *On suppose que*

- *pour tout $i \geq 1$, la fonction $t \rightarrow f(i, t)$ est deux fois continûment différentiable sur $(0, T)$ et les séries*

$$\sum_{i \geq 1} \int_0^T |f(i, t)| dt, \quad \sum_{i \geq 1} \int_0^T \left| \frac{\partial f}{\partial t}(i, t) \right| dt, \quad \sum_{i \geq 1} \int_0^T \left| \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(i, t) \right| dt$$

convergent,

- *$\tilde{K}$ est à variation inférieure bornée $V_\star(\tilde{K})$.*

Alors la discrédance à l'origine de J^p par rapport à f_p vérifie :

$$\begin{aligned} D_N^\star(J^p; f_p) &\leq e^{ct_p} D_N^\star(J^0; f_0) + \Delta t \sum_{i \geq 1} \int_0^{t_p} e^{c(t_p-t)} \left| \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(i, t) \right| dt \\ &\quad + \left(4V_\star(\tilde{K}) + 3\tilde{K}^\infty + \frac{2}{\Delta t} \right) \frac{e^{ct_p}}{cb^{\lfloor (m-t)/3 \rfloor}}, \end{aligned}$$

avec

$$c := \sup_{i \geq 1} V(\tilde{K}(i, .)) + \sup_{j \geq 1} V(\tilde{K}(., j)) + 3\tilde{K}^\infty.$$

Ce résultat indique une majoration (déterministe) de convergence en $\mathcal{O}(1/N^{1/3})$, plus mauvaise que l'ordre (stochastique) de la méthode de Monte Carlo. Les résultats des expériences numériques repris dans [74] montrent un ordre en $\mathcal{O}(1/N^{0.67})$, ce qui pourrait suggérer un ordre théorique $\mathcal{O}(1/N^{2/3})$. De plus la majoration de la proposition précédente croît linéairement avec le nombre de pas de temps. Ce n'est pas le comportement de la discrédance calculée dans les mêmes expériences numériques.

5.2.2 Essais numériques : cas de l'équation discrète

Dans ce paragraphe, nous testons la validité du schéma SS présenté précédemment en comparant les résultats obtenus par cette approche à ceux obtenus par une méthode MC classique.

Les noyaux de coagulation classiques de la littérature sont les noyaux constant, linéaire et multiplicatif donnés respectivement par :

$$K_0(i, j) = 1, \quad K_1(i, j) = i + j \quad \text{et} \quad K_2(i, j) = ij,$$

puisque dans ces cas, si la distribution initiale est une mesure de Dirac, les solutions de l'équation de Smoluchowski peuvent être explicitées : voir l'article de Aldous [1].

Nous considérons ici les noyaux K_0 et K_1 avec une distribution initiale $f_0 = \delta_1$. Remarquons que le noyau modifié $\tilde{K}_1$ n'est pas borné. On a $C_1 = 1$. Le moment d'ordre $\mu \geq 0$ de la densité c est défini par

$$C_\mu(t) := \sum_{i \geq 1} i^\mu c(i, t) = \sum_{i \geq 1} i^{\mu-1} f(i, t).$$

- Si $K_0(i, j) = 1$ alors la solution exacte de (5.2.3) est donnée par :

$$f(i, t) = \frac{4i}{(t+2)^2} \left(\frac{t}{t+2} \right)^{i-1}, \quad i \geq 1, \quad t \geq 0,$$

ce qui entraîne

$$C_0(t) = \frac{2}{2+t} \quad \text{et} \quad C_2(t) = 1+t.$$

- Si $K_1(i, j) = i+j$ alors la solution exacte de (5.2.3) est donnée dans [38] par :

$$f(i, t) = \frac{i^i}{i!} (1 - e^{-t})^{i-1} e^{-i(1-e^{-t})-t}, \quad i \geq 1, \quad t \geq 0,$$

et par suite

$$C_0(t) = e^{-t} \quad \text{et} \quad C_2(t) = e^{2t}.$$

Comme

$$C_0(t) = \sum_{i \geq 1} c(i, t) = \sum_{i \geq 1} \frac{f(i, t)}{i} \quad \text{et} \quad C_2(t) := \sum_{i \geq 1} i^2 c(i, t) = \sum_{i \geq 1} i f(i, t),$$

le schéma numérique permet de les approcher respectivement par

$$C_0(t_p) \approx \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{1}{j_k^p} \quad \text{et} \quad C_2(t_p) \approx \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N j_k^p.$$

On calcule les moments d'ordre 0 et 2 au temps $T = 1, 0$ avec $N = (4m)^3$ particules, $1 \leq m \leq 8$ et un pas de temps $\Delta t = T/P$ où $P = 4000$, par les schémas Monte Carlo usuel et Monte Carlo stratifié Sudoku. Afin d'estimer les variances de ces deux approches, nous avons répété les calculs des moments 1000 fois puis nous avons calculé la variance empirique des valeurs ainsi obtenues. Les résultats sont représentés dans la Figure 5.1 pour le noyau constant et 5.2 pour le noyau linéaire.

Il est clair que les variances de la méthode SS sont inférieures à celles de la méthode MC, pour les deux noyaux considérés.

Si l'on suppose que la variance est de l'ordre de $N^{-\beta}$, la valeur de β peut être estimée par une régression linéaire. Les résultats sont indiqués dans la Table 5.1.

Ces valeurs montrent que le nouvel algorithme est plus précis qu'une simulation stochastique classique.

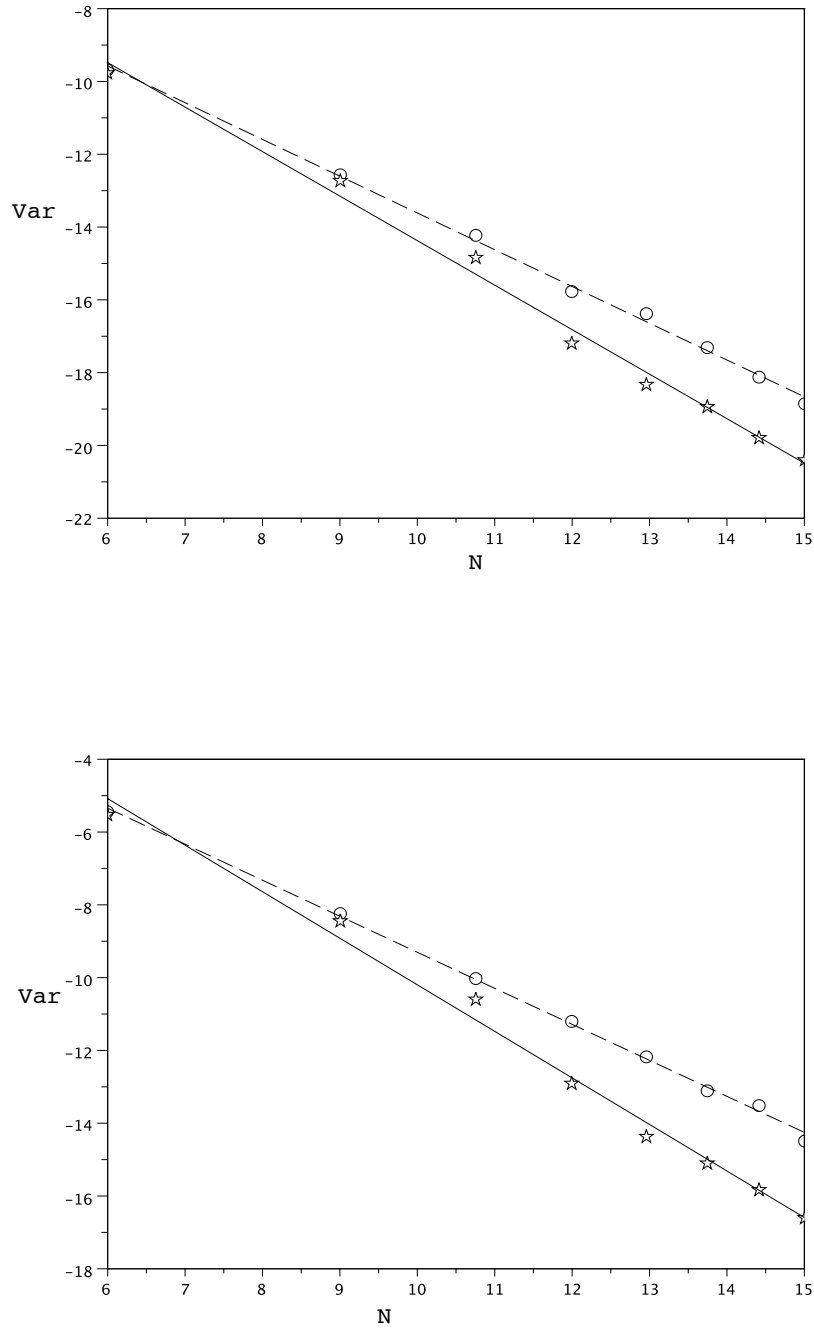


FIGURE 5.1 – Noyau de coagulation constant. Valeurs des variances et ajustements linéaires des estimations SS ($\star$) et MC ($\circ$) des moments $C_0(T)$ (en haut) et $C_2(T)$ (en bas) en fonction de N ($4^3 \leq N \leq 32^3$), pour 1 000 répétitions indépendantes. Les échelles sont logarithmiques à base 2.

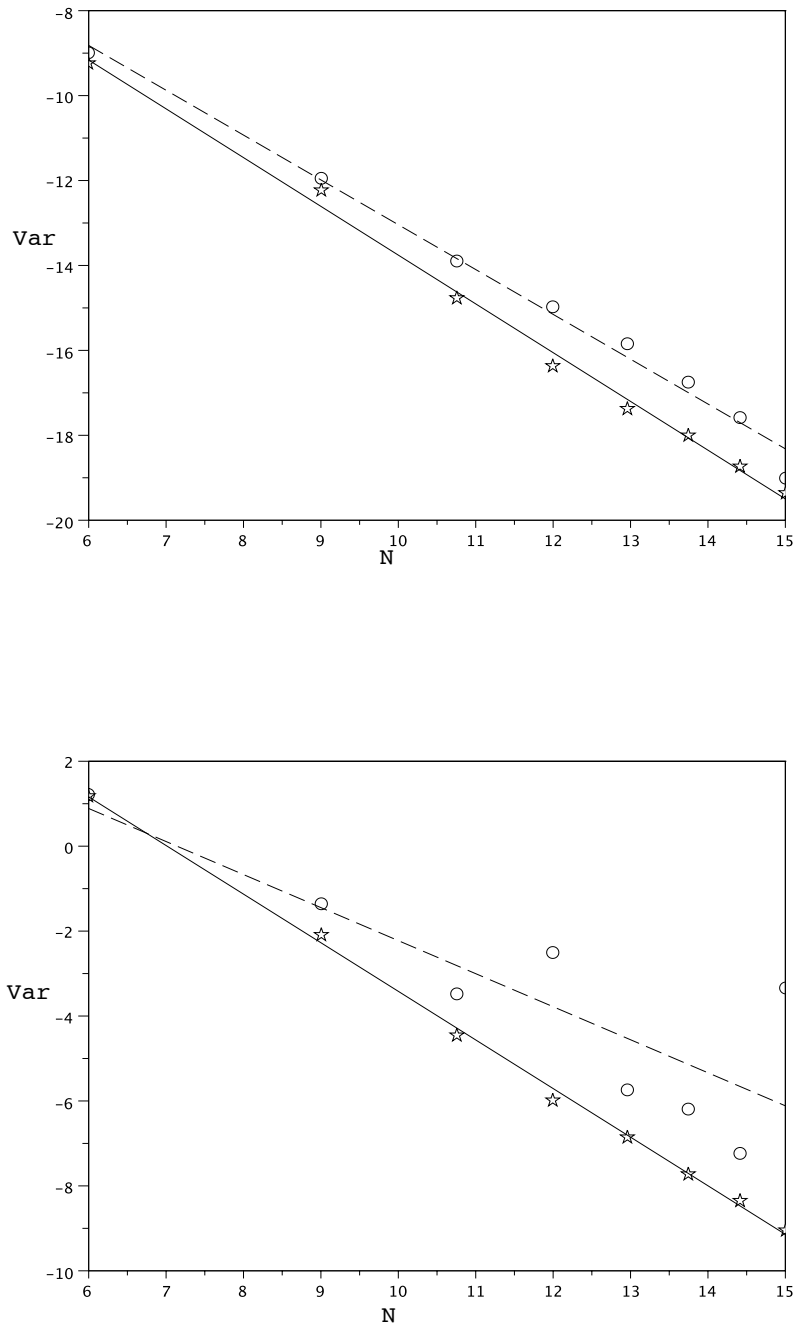


FIGURE 5.2 – Noyau de coagulation linéaire. Valeurs des variances et ajustements linéaires des estimations SS (★) et MC (○) des moments $C_0(T)$ (en haut) et $C_2(T)$ (en bas) en fonction de N ($4^3 \leq N \leq 32^3$), pour 1 000 répétitions indépendantes. Les échelles sont logarithmiques à base 2.

TABLE 5.1 – Équation de coagulation discrète : estimation des ordres β des variances comme fonctions de N pour les calculs de $C_0(T)$ et $C_2(T)$.

$C_0(T)$	Noyau	MC	SS	$C_2(T)$	Noyau	MC	SS
	constant	1,01	1,22		constant	0,99	1,28
	linéaire	1,06	1,15		linéaire	0,78	1,14

5.3 Algorithme MC stratifié Sudoku pour l'équation de coagulation continue

Nous considérons à présent la version continue de l'équation de coagulation, introduite par Müller [93] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t}(x, t) = & \frac{1}{2} \int_0^x K(x-y, y) c(x-y, t) c(y, t) dy \\ & - \int_0^{+\infty} K(x, y) c(x, t) c(y, t) dy, \quad x > 0, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

avec une distribution initiale $c(x, 0) = c_0(x) \geq 0$, $x > 0$, et un noyau de coagulation $K(x, y)$ qui, comme dans le cas discret, exprime la probabilité que deux particules de tailles x et y fusionnent en une particule de taille $x + y$. On suppose que ce noyau est positif et symétrique

$$\forall x, y > 0, \quad K(x, y) \geq 0 \quad \text{et} \quad K(x, y) = K(y, x).$$

Cette modélisation de la coagulation est intéressante, quand on considère aussi des phénomènes de fragmentation : on ajoute alors des termes intégraux linéaires au membre de droite. La concentration des particules de taille dans $[x, x + dx]$ à l'instant t est représentée par $c(x, t)dx$. La densité $c(x, t)$ peut augmenter suite à la coagulation de particules de tailles $x - y$ et $y < x$ ou diminuer par la coagulation de particules de tailles x avec d'autres.

Le nombre total de particules

$$C_0(t) := \int_0^{+\infty} c(x, t) dx$$

décroît au cours du temps à cause du phénomène de coagulation, alors que la masse totale des particules

$$C_1(t) := \int_0^{+\infty} xc(x, t) dx$$

reste constante. Cela se démontre comme pour l'équation discrète et exprime la conservation de la masse dans le système.

On connaît peu de solutions exactes de l'équation ; elles se limitent à des conditions initiales spécifiques et des noyaux simples. Comme dans le cas discret, on transforme

l'équation en changeant de fonction inconnue. Un algorithme quasi-Monte Carlo de simulation de l'équation continue a été proposé par Lécot et Tarhini [71, 123]. Il est utilisé pour la modélisation des sprays dans [124, 75].

Nous présentons dans ce qui suit un algorithme MC stratifié Sudoku pour la simulation de l'équation continue (5.3.1) semblable à celui de la section précédente. On introduit la densité de masse

$$f(x, t) := \frac{xc(x, t)}{C_1},$$

où $C_1 := C_1(0)$. En multipliant l'équation (5.3.1) par x et en effectuant le changement de fonction, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) = & \int_0^x \tilde{K}(x-y, y) f(x-y, t) f(y, t) dy \\ & - \int_0^{+\infty} \tilde{K}(x, y) f(x, t) f(y, t) dy, \quad x > 0, t > 0, \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

où

$$\tilde{K}(x, y) := \frac{C_1 K(x, y)}{y}, \quad x, y > 0$$

est le noyau de coagulation modifié. On note $f_0(x) := xc_0(x)/C_1$ la densité de masse initiale. On a donc

$$\forall t > 0, \quad \int_0^{+\infty} f(x, t) dx = \int_0^{+\infty} f(x, 0) dx = 1. \quad (5.3.3)$$

Soit $\mathcal{S}(\mathbb{R}_+)$ l'ensemble des fonctions définies sur $\mathbb{R}_+$, positives, mesurables et dont l'image est un sous-ensemble fini de $\mathbb{R}_+$. On considère la formulation faible de l'équation (5.3.2) suivante : pour toute fonction-test $\sigma \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_+)$

$$\frac{d}{dt} \int_0^{+\infty} f(x, t) \sigma(x) dx = \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \tilde{K}(x, y) f(x, t) f(y, t) (\sigma(x+y) - \sigma(x)) dy dx. \quad (5.3.4)$$

5.3.1 Description du schéma

On suppose que le noyau modifié est borné et on note

$$\tilde{K}^\infty := \sup_{x, y > 0} \tilde{K}(x, y).$$

Comme dans le cas discret, le schéma peut fonctionner sans cette condition, en adaptant le pas de temps. Les étapes de l'algorithme sont les mêmes que dans le cas de l'équation discrète ; nous les rappelons.

Initialisation

Soit N un entier de la forme $N := n^3$, avec $n \geq 1$. On construit un ensemble de N points

$$X^0 = \{x_1^0, \dots, x_N^0\} \subset \mathbb{R}_+$$

tel que la densité de masse initiale $f_0(x)$ soit approchée par :

$$f^0(x) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^0).$$

Ceci peut être effectué en posant

$$x_k^0 := F_0^{-1} \left(\frac{2k-1}{2N} \right), \quad 1 \leq k \leq N,$$

où

$$F_0(x) := \int_0^x f_0(y) dy$$

est la fonction de répartition associée à f_0 .

Évolution

Soit $\Delta t = T/P$ un pas de temps fixé tel que $\Delta t \tilde{K}^\infty < 1$. On note $t_p = p\Delta t$ et $f_p(x) := f(x, t_p)$ la densité de masse à l'instant t_p . Pour $0 \leq p < P$, on cherche une approximation de f_{p+1} de la forme

$$f^{p+1}(x) := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^{p+1}),$$

à partir des tailles des particules $x_1^p, \dots, x_N^p$ de l'étape p .

1. *Rénumérotation des particules.* Comme dans le cas discret, les particules de l'étape p sont triées selon leur masse croissante :

$$x_1^p \leq x_2^p \leq \dots \leq x_N^p.$$

Cette stratégie a été validée pour la simulation de la diffusion dans le chapitre 4 et par Lécot et Tarhini [71, 123] et Lécot, Tembely, Soucemarianadin et Tarhini [75] dans le contexte de l'approche QMC de l'équation de coagulation continue.

2. *Intégration numérique.* Une discrétisation d'Euler de l'équation (5.3.2) permet de définir une mesure g^{p+1} telle que pour toute fonction-test $\sigma \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_0^{+\infty} g^{p+1}(x) \sigma(x) - \int_0^{+\infty} f^p(x) \sigma(x) \right) = \\ \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \tilde{K}(x, y) f^p(x) f^p(y) (\sigma(x+y) - \sigma(x)), \end{aligned}$$

c'est-à-dire, en exprimant f^p :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{+\infty} g^{p+1}(x) \sigma(x) &= \frac{1}{N} \sum_{k_1=1}^N \left(1 - \frac{\Delta t}{N} \sum_{k_2=1}^N \tilde{K}(x_{k_1}^p, x_{k_2}^p) \right) \sigma(x_{k_1}^p) \\ &+ \frac{\Delta t}{N^2} \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N \tilde{K}(x_{k_1}^p, x_{k_2}^p) \sigma(x_{k_1}^p + x_{k_2}^p). \end{aligned}$$

Soient $\mathbf{1}_{k_1, k_2}$ et I_{k_1, k_2}^p les fonctions indicatrices respectives de

$$\left[\frac{k_1 - 1}{N}, \frac{k_1}{N} \right) \times \left[\frac{k_2 - 1}{N}, \frac{k_2}{N} \right) \quad \text{et} \quad \left[0, \Delta t \tilde{K}(x_{k_1}^p, x_{k_2}^p) \right).$$

À $\sigma \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_+)$ on associe une fonction notée Γ_σ^{p+1} définie par

$$\Gamma_\sigma^{p+1}(u) := \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N \mathbf{1}_{k_1, k_2}(u_1, u_2) \left((1 - I_{k_1, k_2}^p(u_3)) \sigma(x_{k_1}^p) + I_{k_1, k_2}^p(u_3) \sigma(x_{k_1}^p + x_{k_2}^p) \right),$$

pour $u = (u_1, u_2, u_3) \in I^3$. Le problème d'approximation se transforme alors en un problème d'intégration sur I^3 puisque

$$\int_0^{+\infty} g^{p+1}(x) \sigma(x) = \int_{I^3} \Gamma_\sigma^{p+1}(u) du. \quad (5.3.5)$$

On considère un ensemble de points stratifié Sudoku :

$$\mathcal{W} = \{W_\ell : \ell = (\ell_1, \ell_2, \ell_3), 1 \leq \ell_1, \ell_2, \ell_3 \leq n\}$$

défini par

$$W_\ell = (W_{\ell,1}, W_{\ell,2}, W_{\ell,3}) := \left(\frac{\ell_1 - 1}{n} + \frac{\sigma^1(\ell_2, \ell_3) - 1}{n^3} + \frac{\xi_\ell^1}{n^3}, \right. \\ \left. \frac{\ell_2 - 1}{n} + \frac{\sigma^2(\ell_1, \ell_3) - 1}{n^3} + \frac{\xi_\ell^2}{n^3}, \frac{\ell_3 - 1}{n} + \frac{\sigma^3(\ell_1, \ell_2) - 1}{n^3} + \frac{\xi_\ell^3}{n^3} \right),$$

où σ^1, σ^2 et σ^3 sont des bijections aléatoires de $\{1, \dots, n\}^2$ dans $\{1, \dots, n^2\}$ et $\xi_\ell^1, \xi_\ell^2, \xi_\ell^3$ sont des variables aléatoires uniformément distribuées sur I . Toutes ces variables aléatoires sont supposées indépendantes. Cet ensemble vérifie les deux propriétés d'uniformité (P1) et (P2) rappelées dans l'étude de l'équation de coagulation discrète. En effectuant une quadrature dans le membre de droite de (5.3.5) à l'aide de l'ensemble $\mathcal{W}$, l'approximation f^{p+1} est déterminée par :

$$\int_0^{+\infty} f^{p+1}(x) \sigma(x) = \frac{1}{N} \sum_{\ell} \Gamma_\sigma^{p+1}(W_\ell),$$

pour toute fonction-test $\sigma \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_+)$. Si l'on note $k(u) := \lfloor Nu \rfloor$, pour $u \in I$, les tailles des particules à l'étape $p+1$ sont déterminées par :

$$x_{k(W_{\ell,1})}^{p+1} = \begin{cases} x_{k(W_{\ell,1})}^p + x_{k(W_{\ell,2})}^p & \text{si } W_{\ell,3} < \Delta t \tilde{K}(x_{k(W_{\ell,1})}^p, x_{k(W_{\ell,2})}^p), \\ x_{k(W_{\ell,1})}^p & \text{sinon,} \end{cases}$$

pour tout $\ell = (\ell_1, \ell_2, \ell_3)$, avec $1 \leq \ell_1 \leq n, 1 \leq \ell_2 \leq n, 1 \leq \ell_3 \leq n$. Les composantes $W_{\ell,1}$ et $W_{\ell,2}$ des points permettent de sélectionner les particules à l'instant t_p : la particule d'indice $k(W_{\ell,1})$ peut coaguler avec la particule d'indice $k(W_{\ell,2})$ avec une probabilité de coagulation

$$P_c := \Delta t \tilde{K}(x_{k(W_{\ell,1})}^p, x_{k(W_{\ell,2})}^p).$$

La troisième composante $W_{\ell,3}$ est utilisée pour déterminer un événement :

- si $0 < W_{\ell,3} \leq P_c$, les deux particules fusionnent pour former une particule de taille $x_{k(W_{\ell,1})}^p + x_{k(W_{\ell,2})}^p$;
- si $P_c < W_{\ell,3} < 1$, il n'y a pas de coagulation.

Comme dans le cas de l'équation discrète, les propriétés de répartition de l'ensemble stratifié Sudoku assurent que chaque particule sera considérée une fois comme particule *primaire* et une fois comme particule *partenaire* et cela à chaque pas de temps.

L'approche Monte Carlo consiste à prendre un système de particules qui interagissent et forment des particules plus grandes en fonction de la dynamique décrite par l'équation de coagulation. À chaque pas de temps et pour chaque particule, un partenaire de coagulation est choisi de manière aléatoire dans l'ensemble des particules et une variable aléatoire de loi uniforme dans $(0, 1)$ est utilisée pour déterminer si la coagulation a lieu ou non. Dans cette approche, aucun tri des particules n'est effectué. La détermination des tailles des particules à partir des tailles précédentes se fait par :

$$x_k^{p+1} = \begin{cases} x_k^p + x_{L_k}^p & \text{si } U_k < \Delta t \tilde{K}(x_k^p, x_{L_k}^p), \\ x_k^p & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $L_1, \dots, L_N$ sont des variables aléatoires indépendantes uniformément distribuées dans $\{1, 2, \dots, N\}$ et $U_1, \dots, U_N$ sont des variables aléatoires indépendantes uniformément distribuées dans $[0, 1]$. Les variables $\{L_k, U_k : 1 \leq k \leq N\}$ sont supposées indépendantes.

Un algorithme QMC a été proposé dans [123], où une borne d'erreur théorique est prouvée. Pour des entiers $b \geq 2$ et $m \geq 1$ on pose $N := b^m$ le nombre de particules. Soit $Y = \{y_0, y_1, \dots\} \subset I^3$ une suite à faible discrédance ; on suppose que Y est une suite- $(t, 3)$ en base b pour $t \geq 0$ (voir [96, 98]). On note

$$Y^p = \{y_q : pN \leq q < (p+1)N\} \text{ et } \pi' \text{ la projection définie par } \pi'(y_1, y_2, y_3) := (y_1, y_2).$$

On suppose que l'ensemble des points $\pi'(Y^p)$ est un réseau- $(0, m, 2)$ en base b .

Soit $X^0 := \{x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0\}$ un ensemble de particules tel que la densité f_0 soit approchée par la somme de mesures de Dirac

$$f^0 := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \delta(x - x_k^0) \simeq f_0.$$

Soit X^p l'ensemble de particules à l'instant t_p , obtenu en faisant des quadratures quasi-Monte Carlo dans l'algorithme précédent : on remplace les ensembles de points stratifiés Sudoku $\mathcal{W}$ par les segments Y^p de la suite Y . La notion de variation de fonction sur $\mathbb{R}_+$ est l'analogue de la variation au sens de Hardy et Krause. La discrédance à l'origine par rapport à une densité de probabilité est une variante de la discrédance à l'origine (par rapport à la mesure de Lebesgue). Le résultat suivant est établi dans [123] :

Proposition 5.2 *On suppose :*

- pour tout $x > 0$, la fonction $t \rightarrow f(x, t)$ est deux fois continûment différentiable sur $(0, T)$ et les fonctions $f, \frac{\partial f}{\partial t}, \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$ sont intégrables sur $\mathbb{R}_+^* \times (0, T)$,

- $\tilde{K}$ est à variation bornée au sens de Hardy et Krause.

Alors

$$\begin{aligned} D_N^*(X^p; f_p) &\leq e^{ct_p} D_N^*(X^0; f_0) + \Delta t \int_0^{+\infty} \int_0^{t_p} e^{c(t_p-t)} \left| \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(x, t) \right| dt dx \\ &\quad + \left(\left(\frac{2}{\Delta t} + c_K \right) \frac{1}{b^{\lfloor (m-t)/3 \rfloor}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\left\lfloor \frac{(b-1)(m-t)}{2} + \frac{3}{2} \right\rfloor \frac{1}{\Delta t} \right) \frac{1}{b^{\lfloor (m-t)/2 \rfloor}} \right) \frac{e^{ct_p} - 1}{c}, \end{aligned}$$

où

$$c_K := 4V(\tilde{K}) + 3\tilde{K}^\infty \quad \text{et} \quad c := \sup_{x>0} V(\tilde{K}(x, \cdot)) + \sup_{y>0} V(\tilde{K}(\cdot, y)) + 3\tilde{K}^\infty.$$

Comme dans le cas de l'équation discrète, ce résultat indique une majoration (déterministe) de convergence en $\mathcal{O}(1/N^{1/3})$, plus mauvaise que l'ordre (stochastique) de la méthode de Monte Carlo. Les résultats des expériences numériques repris dans [123] montrent un ordre en $\mathcal{O}(1/N^{0,64})$, ce qui pourrait suggérer un ordre théorique $\mathcal{O}(1/N^{2/3})$. De plus la majoration de la proposition précédente croît linéairement avec le nombre de pas de temps. Ce n'est pas le comportement de la discrétisation calculée dans les mêmes expériences numériques.

5.3.2 Essais numériques : cas de l'équation continue

Nous reprenons les essais numériques de [123] pour l'équation de coagulation continue. Nous comparons la performance du nouvel algorithme SS à celle du schéma MC classique en calculant les variances des estimations. On considère les deux noyaux

$$K_0(x, y) = 1 \quad \text{et} \quad K_1(x, y) = x + y, \quad \forall x, y > 0$$

pour lesquels les solutions exactes sont connues (pour certaines données initiales).

Le moment d'ordre $\mu \geq 0$ défini par

$$C_\mu(t) := \int_0^{+\infty} x^\mu c(x, t) dx = \int_0^{+\infty} x^{\mu-1} f(x, t) dx$$

peut être approché numériquement, à l'instant t_p par :

$$C_{\mu,p} := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (x_k^p)^{\mu-1}.$$

- Noyau de coagulation constant. On considère le noyau de coagulation $K_0(x, y) = 1$ et la distribution initiale

$$c_0(x) := e^{-x}, \quad x \geq 0.$$

Alors $C_1 = 1$. Dans ce cas, la solution exacte de l'équation (5.3.1) a été calculée par Ramabhadran, Peterson et Seinfeld dans [113]; elle est donnée par :

$$c(x, t) = \frac{4}{(2+t)^2} \exp\left(-\frac{2x}{2+t}\right), \quad x \geq 0, \quad t \geq 0.$$

Les valeurs exactes des moments d'ordre 0 et 2 sont les suivantes :

$$C_0(t) = \frac{2}{2+t} \quad \text{et} \quad C_2(t) = t + 2, \quad t \geq 0.$$

Pour estimer les variances des deux approches, nous effectuons M estimations indépendantes des moments d'ordre 0 et 2 à l'instant $T = 1, 0 : C_0(T)$ et $C_2(T)$ par chacune des méthodes, puis nous calculons la variance empirique des échantillons. Les différences entre les estimations pour $M = 100, \dots, 1\,000$ sont minimales ; nous nous limitons au cas $M = 1\,000$. La Figure 5.3 montre les variances en fonction du nombre de particules N , qui est ici de la forme $N = (4m)^3$, avec $1 \leq m \leq 12$. Le nombre de pas de temps est $P = 4\,000$.

La variance du schéma SS est inférieure à celle du schéma MC pour un même nombre de particules. À titre d'exemple, dans l'approximation de $C_2(T)$, la variance obtenue avec 21 952 points stratifiés Sudoku est comparable à celle obtenue avec 46 656 points aléatoires.

L'amélioration est moins visible dans l'estimation de $C_0(T)$; il s'agit ici de calculer la somme

$$C_{0,P} := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{1}{x_k^P},$$

avec des points x_k^P qui peuvent être proches de 0. Cependant, l'écart entre les résultats des deux méthodes augmente avec le nombre de particules, ce qui suggère que le schéma stratifié est *asymptotiquement* meilleur que le schéma MC.

- Noyau de coagulation linéaire Nous considérons l'équation de coagulation avec le noyau

$$K_1(x, y) = x + y,$$

et la distribution initiale

$$c_0(x) = e^{-x}, \quad x \geq 0.$$

Ici encore $C_1 = 1$. Sous ces conditions, la solution exacte du problème s'écrit [113] :

$$c(x, t) = \frac{1}{x\sqrt{1-e^{-t}}} e^{-x(2-e^{-t})-t} I_1\left(2x\sqrt{1-e^{-t}}\right), \quad x \geq 0, \quad t \geq 0, \quad (5.3.6)$$

où I_1 est la fonction de Bessel modifiée de première espèce et du premier ordre [39].

Remarquons qu'ici, $\tilde{K}_1$ n'est pas borné et donc l'inégalité

$$\Delta t \tilde{K}_1(x, y) < 1$$

n'est pas assurée. Pour que cette inégalité soit toujours vérifiée nous effectuons les calculs jusqu'à l'instant $T = 0, 1$.

Dans la Figure 5.4 sont représentées les variances en fonction du nombre de particules N pour les calculs des moments $C_0(T)$ et $C_2(T)$. Nous avons effectué $M = 1\,000$ répétitions indépendantes de chacun des calculs, pour les deux méthodes avec un

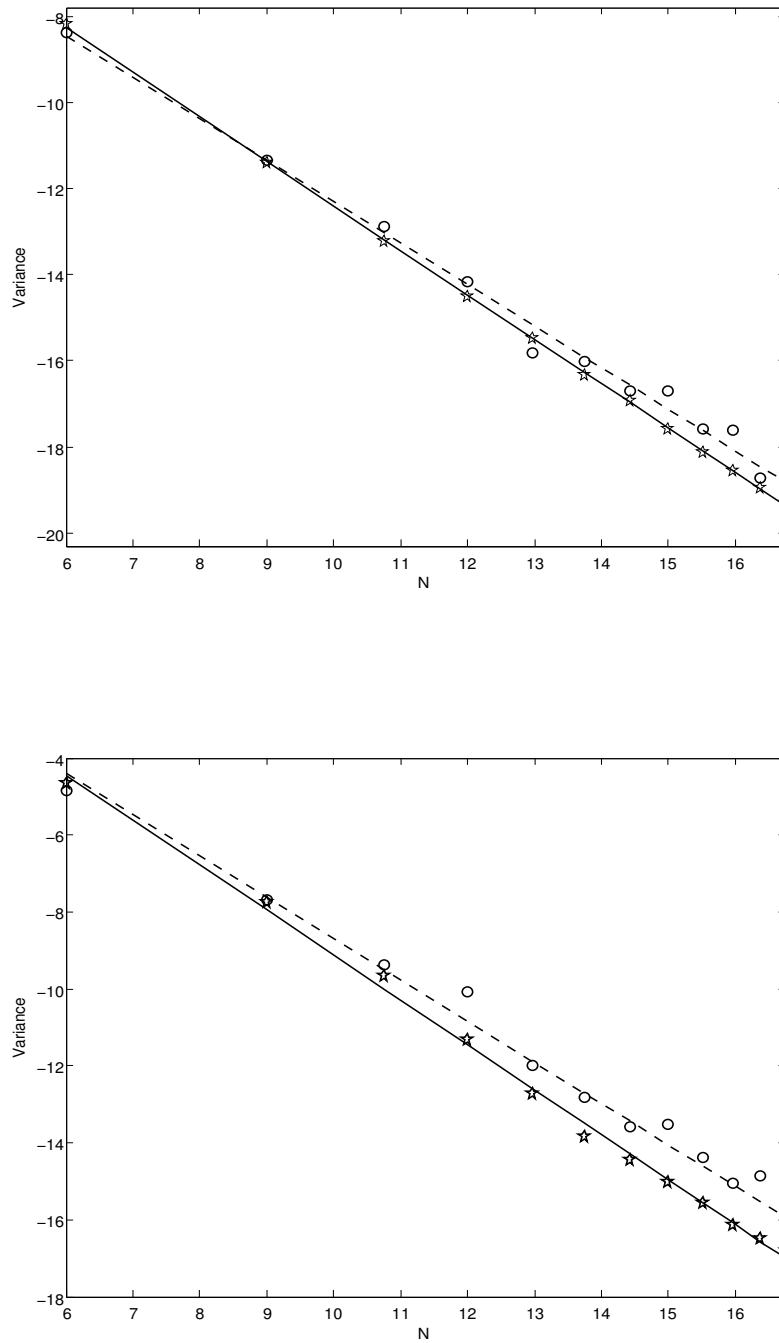


FIGURE 5.3 – Noyau constant : variances de $M = 1000$ estimations des moments $C_0(T)$ (en haut) et $C_2(T)$ (en bas), en fonction de N . Comparaison des approches MC (o) et SS (*) avec ajustements linéaires.

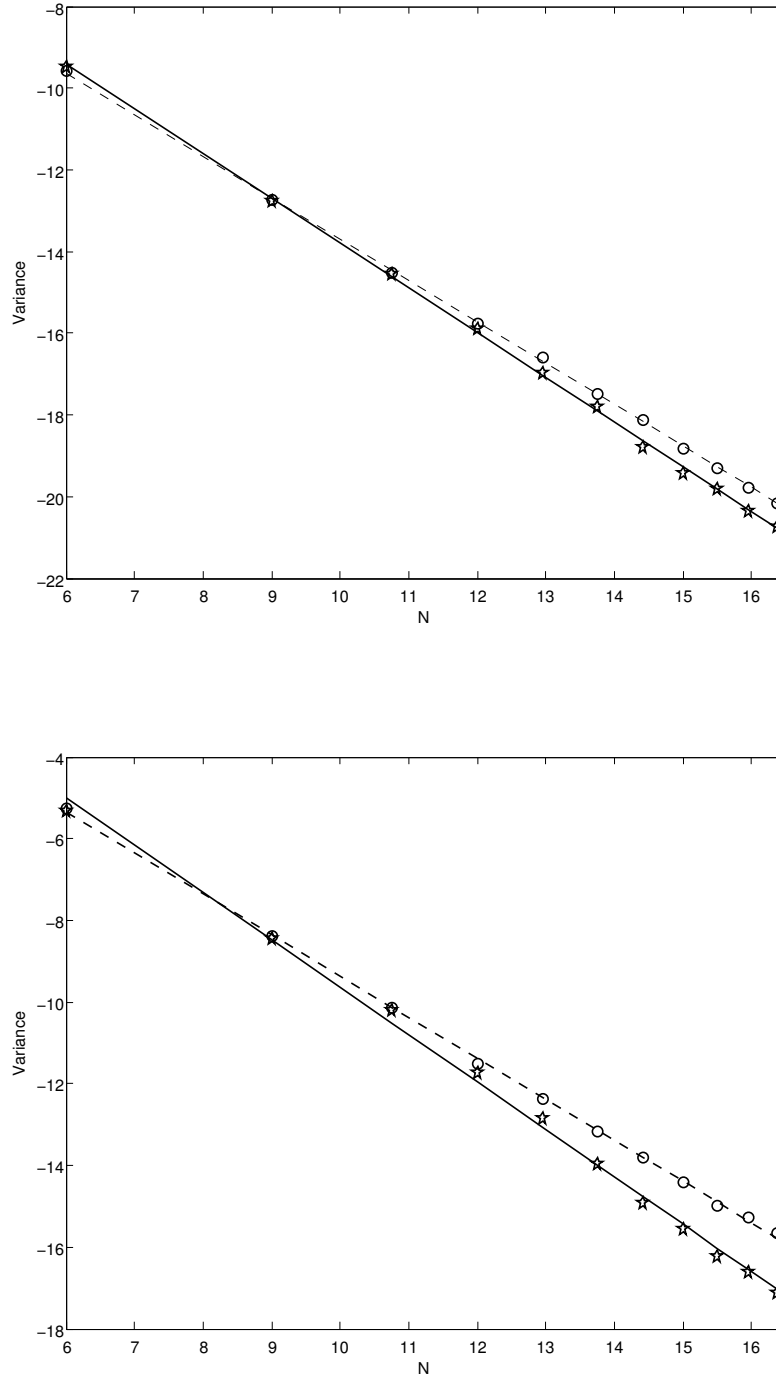


FIGURE 5.4 – Noyau linéaire : variances de $M = 1000$ estimations des moments $C_0(T)$ (en haut) et $C_2(T)$ (en bas), en fonction de N . Comparaison des approches MC ($\circ$) et SS ($\star$) avec ajustements linéaires.

TABLE 5.2 – Équation continue : estimation des ordres des variances comme fonctions de N pour les calculs de $C_0(T)$ et $C_2(T)$.

$C_0(T)$	Noyau	MC	SS	$C_2(T)$	Noyau	MC	O+SS
	constant	0,96	1,04		constant	1,06	1,18
	linéaire	1,00	1,10		linéaire	1,00	1,16

nombre de pas de temps $P = 4000$ et un nombre de particules $N = (4m)^3$, où $m = 1, \dots, 12$.

Ici encore, la variance de l'estimateur stratifié reste inférieure à celle de la méthode MC simple.

Pour estimer la vitesse de convergence des méthodes MC et SS, nous calculons l'ordre des variances en effectuant une régression linéaire. Les résultats sont regroupés dans la Table 5.2 pour 1000 estimations. Pour le noyau constant, $T = 1,0$ et pour le noyau linéaire, $T = 0,1$.

Il est clair que la substitution des points aléatoires par des points stratifiés et le tri des particules de simulation améliorent la convergence.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, des algorithmes de Monte Carlo stratifié Sudoku ont été développés pour la simulation des équations de coagulation discrète et continue.

Les schémas sont itératifs et consistent à approcher la distribution initiale par un ensemble de particules qui vont évoluer au cours du temps en pouvant s'assembler entre elles pour former des particules de tailles plus grandes, selon la dynamique de l'équation. L'évolution des particules se fait en utilisant des ensembles de points stratifiés Sudoku. Pour profiter des propriétés de régularité de répartition de ces ensembles stratifiés, les particules de simulation doivent être ordonnées suivant leur masse croissante à chaque pas de temps. Un avantage de ces algorithmes est que le nombre des particules reste fixe tout au long de la simulation.

Dans les essais numériques, nous avons remarqué que les méthodes proposées sont plus précises que la méthode MC classique puisque leurs variances sont inférieures (pour un même nombre de particules). Cela permet d'affirmer qu'il s'agit bien d'une technique de réduction de la variance de la méthode MC.

Conclusions et perspectives

L'objectif de ce travail était d'explorer les possibilités de méthodes de Monte Carlo stratifiées, utilisant des échantillons proches des réseaux et suites digitales. Il s'agissait de développer des schémas dont les vitesses de convergence soient meilleures que celles des méthodes MC classiques et qui permettent d'obtenir des intervalles de confiance plus accessibles que les bornes d'erreur des méthodes quasi-Monte Carlo.

Dans le premier chapitre nous avons mené une étude bibliographique sur les méthodes de Monte Carlo, les méthodes quasi-Monte Carlo et des méthodes d'hasardisation et nous les avons illustrées à l'aide d'essais numériques.

Ensuite, nous avons proposé des méthodes de Monte Carlo stratifiées. Le point de départ, au deuxième chapitre, était la méthode d'échantillonnage stratifiée simple qui consiste à diviser l'hypercube unité en des sous-cubes identiques et à choisir une variable aléatoire distribuée uniformément dans chaque sous-cube. Nous avons établi une borne de la variance de l'estimateur de la mesure d'un sous-ensemble de l'hypercube unité. L'ordre de convergence trouvé est meilleur que celui d'une méthode MC classique. Nous avons aussi analysé l'échantillonnage par hypercube latin, qui ne semble pas améliorer l'ordre de convergence de la variance.

Dans le troisième chapitre, nous avons proposé une méthode dite méthode de Monte Carlo stratifiée Sudoku, qui possède les propriétés de la méthode d'échantillonnage stratifiée simple et celles de la méthode d'échantillonnage par hypercube latin. Elle permet de construire un ensemble de points aléatoires vérifiant à la fois les propriétés de stratification multi-dimensionnelle et aussi uni-dimensionnelle. Elle retient certaines propriétés des réseaux digitaux. En considérant l'intégration de fonctions indicatrices d'ensembles, nous avons estimé la variance de cette nouvelle méthode. L'analyse théorique a montré une réduction effective de la variance de l'estimateur. La justesse de l'estimation a été validée par des expériences numériques. On a privilégié le cas des fonctions indicatrices, car on peut interpréter certaines simulations MC comme une suite de quadratures de fonctions indicatrices d'ensembles multi-dimensionnels à frontière compliquée.

Dans le quatrième et le cinquième chapitre, nous avons proposé des utilisations des techniques précédentes pour la résolution numérique de l'équation de diffusion puis de l'équation de Smoluchowski. Pour ces équations instationnaires, on discrétise le temps et on utilise des particules de simulation : à chaque pas de temps, les particules sont triées selon leurs positions ou tailles croissantes et on choisit les événements subis par les particules à l'aide d'un ensemble stratifié Sudoku. On montre sur des exemples que cette méthode fournit des résultats plus précis qu'une méthode de marche aléatoire. Cette précision devient de plus en plus importante avec l'augmentation du nombre de particules utilisées dans la simulation.

Dans ces simulations, la propriété de stratification uni-dimensionnelle garantit la *validité physique* du schéma, en assurant que chacune des particules est considérée à chaque pas de temps; la propriété de stratification multi-dimensionnelle garantit la *précision numérique* du schéma (de la quadrature qu'il contient).

Le travail effectué ici ouvre plusieurs perspectives de recherche.

L'étude de la méthode de stratification développée mérite d'être complétée dans le but d'analyser sa convergence pour les problèmes d'équations différentielles ou intégrales abordées aux chapitres 4 et 5.

Elle a besoin d'être étendue aux cas d'équations en dimension plus élevée. Des algorithmes de tri multi-dimensionnels ont été mis au point dans l'approche quasi-Monte Carlo de la diffusion [68]; une étude de différentes possibilités de tri pour la simulation QMC hasardisée a été faite dans [61].

Un développement de la méthode pour la simulation des sprays est aussi nécessaire. Il s'agira de suivre la démarche initiée dans le cadre de l'approche quasi-Monte Carlo, où l'on a montré que les fluctuations de la distribution des tailles de gouttes pouvait être réduite [124, 75].

L'étude de l'adaptation de la méthode de stratification pour la simulation de la diffusion par résolution de l'équation de Feynman-Kac [82, 83] peut aussi être abordée et semble prometteuse.

Un autre axe intéressant de recherche est l'adaptation de la méthode stratifiée Sudoku à la simulation des chaînes de Markov, suivant ce qui a été fait pour les méthodes QMC dans [72, 73, 19, 18, 20] ou bien pour les méthodes QMC hasardisées dans [59, 60]. Il s'agira de proposer des algorithmes de simulation et d'étudier leur convergence.

Finalement, les travaux futurs incluront l'étude des techniques d'hasardisation des méthodes QMC, comme celles proposées par Owen [109, 111]. Il s'agira d'estimer leur variance dans le cadre de l'intégration de fonctions indicatrices, puis de les appliquer à la résolution de problèmes d'équations différentielles ou intégrales et à la simulation de chaînes de Markov.

Bibliographie

- [1] ALDOUS, D.J., *Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation and coagulation) : a review of the mean-field theory for probabilists*, Bernoulli, **5**, pp. 3–48 (1999).
- [2] ALEXANDROV, V.N. (Ed.), *Special Issue : The Sixth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, Mathematics and Computers in Simulation, **81**, pp. 475–587 (2010).
- [3] ATANASSOV, E.I., *On the discrepancy of the Halton sequence*, Mathematica Balkanica, **18**, pp. 15–32 (2004).
- [4] BABOVSKY, H., *On a Monte Carlo scheme for Smoluchowski's coagulation equation*, Monte Carlo Methods and Applications, **5**, pp. 1–18 (1999).
- [5] BEAUWENS, R., A. DUBUS, and M. HOU (Eds.), *Selection of papers presented at the IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, Mathematics and Computers in Simulation, **47**, pp. 83–518 (1998).
- [6] CHENG, R.C.H. and T. DAVENPORT, *The problem of dimensionality in stratified sampling*, Management Science, **35**, pp. 1278–1296 (1989).
- [7] CHORIN, A.J., *Numerical study of slightly viscous flow*, Journal of Fluid Mechanics, **57**, pp. 785–796 (1973).
- [8] CRANLEY, R. and T. N. L. PATTERSON, *Randomization of number theoretic methods for multiple integration*, SIAM Journal of Numerical Analysis, , **13(6)**, pp. 904–914 (1976).
- [9] DAUTRAY, R. (sous la direction de), *Méthodes probabilistes pour les équations de la physique*, Série Synthèses, Eyrolles, Paris (1989).
- [10] DAVIS, P. and P. RABINOWITZ, *Méthods of numerical integration*, 2nd ed., Academic Press, San Diego (1984).
- [11] DEBRY, E., B. SPORTISSE, and B. JOURDAIN, *A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols*, Journal of Computational Physics, **184**, pp. 649–669 (2003).
- [12] DICK, J. and F. PILLICHSHAMMER, *Digital Nets and Sequences, Discrepancy Theory and Quasi-Monte Carlo Integration*, Cambridge University Press, Cambridge, (2010).

-
- [13] DICK, J., F.Y. KUO, G.W. PETERS, and I.H. SLOAN (EDS.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2012*, Springer-Verlag, à paraître.
 - [14] DIMOV, I. (Ed.), *IMACS Sponsored Special Issue : The Second IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, *Mathematics and Computers in Simulation*, **55**, pp. 1–305, (2001).
 - [15] DRMOTA, M. and R.F. TICHY, *Sequences, Discrepancies and Applications*, *Lecture Notes in Mathematics*, **1651**, Springer, Berlin (1997).
 - [16] DUBUS, A. and K.K. SABELFELD (Eds.), *Selected papers from the Seventh IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, *Monte Carlo Methods and Applications*, **16**, pp. 195–438 (2010).
 - [17] EIBECK, A. and W. WAGNER, *An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena*, *SIAM Journal on Scientific Computing*, **22**, pp. 802–821 (2000).
 - [18] EL HADDAD, R., *Méthodes quasi-Monte Carlo de simulation des chaînes de Markov*, Thèse de doctorat, Université de Savoie et Université Saint-Joseph (2008).
 - [19] EL HADDAD, R., C. LÉCOT and P. L'ECUYER, *Quasi-Monte Carlo simulation of discrete-time Markov chain on multidimensional state space*, in A. Keller, S. Heinrich, and H. Niederreiter (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2006*, pp. 413–429, Berlin, Springer (2007).
 - [20] EL HADDAD, R., C. LÉCOT, P. L'ECUYER, and N. NASSIF, *Quasi-Monte Carlo methods for Markov chains with continuous multi-dimensional state space*, *Mathematics and Computers in Simulation* **81**, pp. 560–567 (2010).
 - [21] EL HADDAD, R., C. LÉCOT, and G. VENKITESWARAN, *Quasi-Monte Carlo simulation of diffusion in a spatially nonhomogeneous medium*, in P. L'Ecuyer and A. Owen (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2008*, Springer, Berlin, pp. 339–354 (2010).
 - [22] EL HADDAD, R., R. FAKHEREDDINE, C. LÉCOT, A. SOUCEMARIANADIN, and M. TEMBELY, *Simulation of coalescence with stratified sampling*, in C. Laroque, J. Himmlerspach, R. Pasupathy, O. Rose and A. M. Uhrmacher (eds.), *Winter Simulation Conference 2012 Proceedings*, IEEE (2012).
 - [23] EL HADDAD, R., R. FAKHREDDINE, and C. LÉCOT, *Stratified Monte Carlo integration*, in K. K. Sabelfeld and I. Dimov (eds.), *Monte Carlo Methods and Applications*, De Gruyter, Berlin, pp. 105–113 (2013).
 - [24] EL HADDAD, R., R. FAKHEREDDINE, C. LÉCOT, and G. VENKITESWARAN, *Extended Latin hypercube sampling for integration and simulation*, in J. Dick, F.Y. Kuo, G.W. Peters, and I.H. Sloan, (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2012*, Springer, Berlin, à paraître.

-
- [25] ENTACHER, K., W. C. SCHMID and A. UHL (Eds.), *Special Issue : 3rd IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, Mathematics and Computers in Simulation, **62**, pp. 217–571 (2003).
- [26] EVANS, M. and T. SWARTZ, *Approximating Integrals via Monte Carlo and Deterministic Methods*, Oxford University Press, Oxford (2000).
- [27] FANG, K.T., F.J. HICKERNELL, and H. NIEDERREITER (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2000*, Springer-Verlag, Berlin (2002).
- [28] FARNELL, L. and W.G. GIBSON, *Monte Carlo simulation of diffusion in a spatially nonhomogeneous medium : correction to the Gaussian steplength*, Journal of Computational Physics, **198**, pp. 65–79 (2004).
- [29] FAURE, H., *Discrépance de suites associées à un système de numération (en dimension un)*, Bulletin de la Société Mathématique de France **109**, pp. 143–182 (1981).
- [30] FAURE, H., *Discrépance de suites associées à un système de numération (en dimension s)*, Acta Arithmetica, **41**, pp. 337–351 (1982).
- [31] FAURE, H. and S. TEZUKA, *Another random scrambling of digital (t, s) -sequences*, in K.-T. Fang, F.J. Hickernell and H. Niederreiter (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2000*, Springer, Berlin. pp. 242–256 (2002).
- [32] FILBET, F., and P. LAURENÇOT, *Numerical simulation of the Smoluchowski coagulation equation*, SIAM Journal on Scientific Computing, **25**, pp. 2004–2028 (2004).
- [33] FISHMAN, G.S , *Monte Carlo, Concepts, Algorithms, and Applications*, Springer Series in Operations Research, New York (1996).
- [34] FOGELSON, A.L. and R.H. DILLON, *Optimal smoothing in function-transport particle methods for diffusion problems*, Journal of Computational Physics, **109**, pp. 155–163 (1993).
- [35] GHONIEM, A.F., and A. S. SHERMAN, *Grid-free simulation of diffusion using random walk methods*, Journal of Computational Physics, **61**, pp. 1–37 (1985).
- [36] GLASSERMAN, P., *Monte Carlo in Financial Engineering*, Applications of Mathematics 53, Springer, New York (2004).
- [37] GOBET, E. and S. MAIRE, *A spectral Monte Carlo method for the Poisson equation*, Monte Carlo methods and applications, **10**, pp. 275–285 (2004).
- [38] GOLOVIN, A., *The solution of the coagulating equation for cloud droplets in a rising air current*, Bulletin of the Academy of Sciences of the U.S.S.R. Geophysics series **5**, pp. 482–487 (1963).
- [39] GRADSHTEYN, I.S. and I.M. RYZHIK, *Table of integrals, Series, and Products*, 5th ed., A. Jeffrey (Ed.), Academic Press, San Diego (1994).

- [40] HABER, S., *A modified Monte-Carlo quadrature*, Mathematics of Computation, **20**, pp. 361–368 (1966).
- [41] HALD, O.H., *Convergence of random methods for a reaction-diffusion equation*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, **2**, pp. 85–94 (1981).
- [42] HALTON, J.H., *On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals*, Numerische Mathematik, **2**, pp. 84–90 (1960). Berichtigung, *ibid.*, p. 196.
- [43] HAMMERSLEY, J.M., *Monte Carlo methods for solving multivariable problems*. Annals of the New York Academy of Sciences, **86**, pp. 844–874 (1960).
- [44] HAMMERSLEY, J.M. and D.C. HANDSCOMB, *Monte Carlo Methods*, Methuen, London (1964).
- [45] HELLEKALEK, P. and G. LARCHER (Eds.), *Random and Quasi-Random Point Sets*, Lecture Notes in Statistics, **138**, Springer, New York, (1998).
- [46] HLAWKA, E., *Funktionen von beschränkter Variation in der Theorie der Gleichverteilung*. Annali di Matematica Pura ed Applicata, **54**, pp. 325–333 (1961).
- [47] HOBSON, E.W., *The Theory of Functions of a Real Variable and the Theory of the Fourier's Series*, 3rd. ed., Cambridge University Press, Cambridge (1950).
- [48] HONG, H.H. and F.J. HICKERNELL, *Algorithm 823 :implementing scrambled digital sequences*, ACM Transactions on Mathematical Software, **29**, pp. 95–109 (2003).
- [49] HUNTER, J.R., P.D. CRAIG, and H.E. PHILLIPS, *On the use of random walk models with spatially variable diffusivity*, Journal of Computational Physics, **106**, pp. 366–376 (1993).
- [50] KELLER, A., S. HEINRICH, and H. NIEDERREITER (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2006*, Springer-Verlag, Berlin (2008).
- [51] KOLODKO, A. A. and W. WAGNER, *Convergence of a Nanbu type method for the Smoluchowski equation*, Monte Carlo Methods and Applications, **3**, pp. 255–273 (1997).
- [52] KOLODKO, A. A., K. SABELFELD, and W. WAGNER, *A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation*. Mathematics and Computers in Simulation, **49**, pp. 57–79 (1999).
- [53] KUIPERS, L. and H. NIEDERREITER, *Uniform Distribution of Sequences*, J. Wiley & Sons, New York (1974).
- [54] LAPEYRE B., E. PARDOUX, and R. SENTIS, *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*, Mathématiques et Applications, **29**, Springer Berlin (1998).

- [55] L'ECUYER, P., *Good parameters and implementations for combined multiple recursive random number generators*, Operations Research, **47**, pp. 159–164 (1999).
- [56] L'ECUYER, P., *Quasi-Monte Carlo methods with applications in finance*, Finance and Stochastics, **13**, pp. 307–349 (2009).
- [57] L'ECUYER, P. and C. LEMIEUX, *Recent advances in randomized quasi-Monte Carlo methods*, in M. Dror, P. L'Ecuyer and F. Szidarovszki (eds.), *Modeling Uncertainty : An Examination of Stochastic Theory, Methods, and Applications*, pp. 419–474, Kluwer Academic Publishers, Boston (2002).
- [58] L'ECUYER, P. and A.B. OWEN (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2008*, Springer-Verlag, Berlin (2009).
- [59] L'ECUYER, P., C. LÉCOT, and B. TUFFIN, *Randomized quasi-Monte Carlo simulation of Markov chains with an ordered state space*, in H. Niederreiter and D. Talay (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2004*, Springer, Berlin, pp. 331–342 (2006).
- [60] L'ECUYER, P., C. LÉCOT, and B. TUFFIN, *A randomized quasi-Monte Carlo simulation method for Markov chains*, Operations Research, **56**, pp. 958–975 (2008).
- [61] L'ECUYER, P., C. LÉCOT and A. L'ARCHEVÊQUE-GAUDET, *On array-RQMC for Markov chains : mapping alternatives and convergence rates*, in P. L'Ecuyer and A. B. Owen (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2008*, pp. 485–500, Springer, Berlin (2009).
- [62] LÉCOT, C., *A direct simulation Monte Carlo scheme and uniformly distributed sequences for solving the Boltzmann equation*, Computing, **41**, pp. 41–57 (1989).
- [63] LÉCOT, C., *Low discrepancy sequences for solving the Boltzmann equation*, Journal of Computational and Applied Mathematics, **25**, pp. 237–249 (1989).
- [64] LÉCOT, C., *A quasi-Monte Carlo method for the Boltzmann equation*, Mathematics of Computation, **56**, pp. 621–644 (1991).
- [65] LÉCOT, C., *Error bounds for quasi-Monte Carlo integration with nets*, Mathematics of Computation, **65**, pp. 179–187 (1996).
- [66] LÉCOT, C., *Quasi-random walk methods*, in S. Ogawa (ed.), *Proceedings of the 5th Workshop on Stochastic Numerics*, Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University, pp. 103–113 (2001).
- [67] LÉCOT, C. and I. COULIBALY, *A quasi-Monte Carlo scheme using nets for a linear Boltzmann equation*, SIAM Journal on Numerical Analysis, **35**, pp. 51–70 (1998).
- [68] LÉCOT, C. and F. EL KHETTABI, *Quasi-Monte Carlo simulation of diffusion*, Journal of Complexity, **15**, pp. 342–359 (1999).

- [69] LÉCOT, C. and A. KOUDIRATY, *Grid-free simulation of convection-diffusion*, in H. Niederreiter and J. Spanier (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 1998*, Springer, Berlin, pp. 311–325 (2000).
- [70] LÉCOT, C. and S. OGAWA, *Quasirandom walk methods*, in K.-T. Fang, F.J. Hickernell, and H. Niederreiter (eds.), *Monte Carlo and Quasi Monte Carlo Methods 2000*, Springer, Berlin, pp. 63–85 (2002).
- [71] LÉCOT, C. and A. TARHINI, *A quasi-stochastic simulation of the general dynamics equation for aerosols*, *Monte Carlo Methods and Applications*, **13**, pp. 369–388 (2007).
- [72] LÉCOT, C. and B. TUFFIN, *Comparison of quasi-Monte Carlo-based methods for the simulation of Markov chains*, *Monte Carlo Methods and Applications*, **10**, pp. 377–384 (2004).
- [73] LÉCOT, C. and B. TUFFIN, *Quasi-Monte Carlo methods for estimating transient measures of discrete time Markov chains*, in H. Niederreiter (ed.), *Monte Carlo and Quasi Monte Carlo Methods 2002*, Springer, Berlin, pp. 329–343 (2004).
- [74] LÉCOT, C. and W. WAGNER, *A quasi-Monte Carlo scheme for Smoluchowski's coagulation equation*, *Mathematics of Computation*, **73**, pp. 1953–1966 (2004).
- [75] LÉCOT, C., M. TEMBELY, A. SOUCEMARIANADIN and A. TARHINI, *Numerical simulation of the drop size distribution in a spray*, in L. Plaskota and H. Wozniakowski (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2010*, Springer, Berlin, pp. 503–517 (2012).
- [76] LEMIEUX, C., *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Sampling*, Springer Series in Statistics, Springer-Verlag, Berlin (2009).
- [77] LEMIEUX, C. and H. FAURE, *New perspectives on $(0, s)$ -sequences*, in P. L'Ecuyer and A. B. Owen (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2008*, pp. 113–130, Springer, Berlin (2009).
- [78] LIDL, R. and H. NIEDERREITER, *Introduction to Finite Fields and Their Applications*, rev. ed., Cambridge University Press, Cambridge (1994).
- [79] LIDL, R. and H. NIEDERREITER, *Finite Fields*, rev. ed., Cambridge University Press, Cambridge (1997).
- [80] LIU, J.S., *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*, Springer-Verlag, New York, (2001).
- [81] MADRAS, N., *Lectures on Monte Carlo Methods*, Fields Institute Monographs, **16**, American Mathematical Society, Providence, RI (2002).
- [82] MAIRE, S. and E. TANRÉ, *Some new simulation schemes for the evaluation of Feynman-Kac representations*, *Monte Carlo methods and applications*, **14**, pp. 29–51 (2008).

- [83] MAIRE, S. and E. TANRÉ, *Monte Carlo approximations of the Neumann problem*, submitted.
- [84] MASCAGNI, M. (Ed.), *Special Issue : Fifth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, Mathematics and Computers in Simulation, **80**, pp. 1145–1143 (2010).
- [85] MATOUŠEK, J., *On the L_2 -discrepancy for anchored boxes*, Journal of Complexity, **14**, pp. 527–556 (1998).
- [86] MATOUŠEK, J., *Geometric Discrepancy : An Illustrated Guide*, Springer, Berlin, (1999).
- [87] MATVEEV, V., A. SHERMAN, and R.S. ZUCKER, *New and corrected simulations of synaptic facilitation*, Biophysical Journal, **83**, pp. 1368–1373 (2002).
- [88] MCKAY, M.D., R.J. BECKMAN, and W.J. CONOVER, *A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code*, Technometrics, **21**, pp. 239–245 (1979).
- [89] METROPOLIS, N. and S. ULAM, *The Monte Carlo method*, Journal of the American Statistical Association, **44**, pp. 335–341 (1949).
- [90] MOROKOFF, W.J. and R.E. CAFLISCH, *A Quasi-Monte Carlo approach to particle simulation of the heat equation*. SIAM Journal on Numerical Analysis, **30**, pp. 1558–1573 (1993).
- [91] MOROKOFF, W.J. and R.E. CAFLISCH, *Quasi random sequences and their discrepancies*. SIAM Journal on Scientific Computing **15**, pp. 1251–1279 (1994).
- [92] MOROKOFF, W.J. and R. E. CAFLISCH, *Quasi-Monte Carlo integration*, Journal of Computational Physics **122**, pp. 218–230 (1995).
- [93] MÜLLER, H., *Zur allgemeinen Theorie der raschen Koagulation*, Kolloidchemische Beihefte, **27**, pp. 223–250 (1928).
- [94] NANBU, N., *Direct simulation scheme derived from Boltzmann equation, I. Monocomponent gases*, Journal of the Physical Society of Japan **49**, pp. 2042–2049 (1980).
- [95] NIEDERREITER, H., *Quasi-Monte Carlo methods and pseudo-random numbers*, Bulletin of the American Mathematical Society, **84**, pp. 957–1041 (1978).
- [96] NIEDERREITER, H., *Point sets and sequences with small discrepancy*, Monatshefte für Mathematik, **104**, pp. 273–337 (1987).
- [97] NIEDERREITER, H., *Low-discrepancy and low-dispersion sequences*, Journal of Number Theory, **30**, pp. 51–70 (1988).
- [98] NIEDERREITER, H., *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics 63, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA (1992).

-
- [99] NIEDERREITER, H. (Ed.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2002*, Springer-Verlag, Berlin (2004).
 - [100] NIEDERREITER, H., *Constructions of (t, m, s) -nets and (t, s) -sequences*. *Finite Fields and Their Applications*, **11**, pp. 578–600 (2005).
 - [101] NIEDERREITER, H. and P.J.-S. SHIUE (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing*, *Lecture Notes in Statistics* 106, Springer-Verlag, New York (1995).
 - [102] NIEDERREITER, H. and J. SPANIER (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo 1998*, Springer-Verlag, Berlin (2000).
 - [103] NIEDERREITER, H. and D. TALAY (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo 2004*, Springer-Verlag, Berlin (2006).
 - [104] H. NIEDERREITER and J.M. WILLS, *Diskrepanz und Distanz von Maßen bezüglich konvexer und Jordanscher Mengen*, *Mathematische Zeitschrift*, **144**, pp. 125–134, (1975). *Berichtigung*, *ibid.* **148**, p. 99 (1976).
 - [105] NIEDERREITER, H., P. HELLEKALEK, G. LARCHER and P. ZINTERHOF (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 1996*, *Lecture Notes in Statistics* 127, Springer-Verlag, New York (1998).
 - [106] OGAWA, S. and C. LÉCOT, *A quasi-random walk method for one-dimensional reaction-diffusion equations*, *Mathematics and Computers in Simulation*, **62**, pp. 487–494 (2003).
 - [107] OWEN, A., *Orthogonal arrays for computer experiments, integration and visualization*, *Statistica Sinica*, **2**, pp. 439–452 (1992).
 - [108] OWEN, A., *Lattice sampling revisited : Monte Carlo variance of means over randomized orthogonal arrays*, *The Annals of Statistics*, **22**, pp. 930–945 (1994).
 - [109] OWEN, A., *Randomly permuted (t, m, s) -nets and (t, s) -sequences*, in H. Niederreiter and P.J.-S. Shiue (eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing*, *Lecture Notes in Statistics*, **106**, Springer, New York, pp. 299–317 (1995).
 - [110] OWEN, A., *Monte Carlo variance of scrambled net quadrature*, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **34**, 1884–1910 (1997).
 - [111] OWEN, A., *Variance with alternative scrambling of digital nets*, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, **13**, pp. 363–378 (2003).
 - [112] PLASKOTA, L. and H. WOŹNIAKOWSKI (Eds.), *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2010*, *Springer Proceedings in Mathematics & Statistics*, vol. 23, Springer-Verlag, Berlin (2012).

- [113] RAMABHADRAN, T. E., T. W. PETERSON, and J. H. SEINFELD, *Dynamics of aerosol coagulation and condensation*, American Institute of Chemical Engineers Journal, **22**, pp. 840–851 (1976).
- [114] SABELFELD, K.K. (Ed.), *Selection of papers presented at the International Conference IV IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, Monte Carlo Methods and Applications, **10**, pp. 183–655 (2004).
- [115] SABELFELD, K.K. and I. DIMOV (Eds.), *Monte Carlo Methods and Applications, Proceedings of the 8th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods*, De Gruyter Proceedings in Mathematics, Walter De Gruyter, Berlin (2013).
- [116] SABELFELD, K.K., S.V. ROGASINSKY, A.A. KOLODKO, and A.I. LEVYKIN, *Stochastic algorithms for solving Smolouchowsky coagulation equation and applications to aerosol growth simulation*, Monte Carlo Methods and Applications, **2**, pp. 41–87 (1996).
- [117] SHERMAN, A. S. and C.S. PESKIN, *A Monte Carlo method for scalar reaction diffusion equations*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, **7**, pp. 1360–1372 (1986).
- [118] SMOLUCHOWSKI, M. V., *Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen*, Physikalische Zeitschrift, **17**, pp. 557–599 (1916).
- [119] SMOLUCHOWSKI, M. V., *Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen*, Zeitschrift für physikalische Chemie, **92**, pp. 129–168 (1916).
- [120] SOBOL, I.M., *On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, **7**, pp. 86–112 (1967).
- [121] STEIN, M., *Large sample properties of simulations using Latin hypercube sampling*, Technometrics, **29**, pp. 143–151 (1987).
- [122] TANG, B., *Orthogonal array-based Latin hypercubes*, Journal of the American Statistical Association, **88**, pp. 1392–1397 (1993).
- [123] TARHINI, A., *Analyse numérique des méthodes quasi-Monte Carlo appliquées aux modèles d'agglomération*, thèse de doctorat, Université de Savoie (2008).
- [124] TEMBELY, M., C. LÉCOT, and A. SOUCEMARIANADIN, *Prediction and evolution of drop-size distribution for a new ultrasonic atomizer*, Applied Thermal Engineering, **31**, pp. 656–667 (2011).
- [125] TEZUKA, S., *Uniform Random Numbers : Theory and Practice*, Kluwer, Boston (1995).
- [126] TEZUKA, S. and H. FAURE, *I-binomial scrambling of digital nets and sequences*, Journal of Complexity, **19**, pp. 744–757 (2003).

- [127] TUFFIN, B., *La Simulation de Monte Carlo*, Éditions Hermès, Paris (2010).
- [128] VENKITESWARAN, G. and M. JUNK, *Quasi-Monte Carlo algorithms for diffusion equations in high dimensions*, Mathematics and Computers in Simulation, **68**, pp. 23–41 (2005).
- [129] VENKITESWARAN, G. and M. JUNK, *A QMC approach for high dimensional Fokker-Planck equations modelling polymeric liquids*, Mathematics and Computers in Simulation, **68**, pp. 45–56 (2005).
- [130] ZAREMBA, S.K., *Some applications of multidimensional integration by parts*, Annales Polonici Mathematici, **21**, pp. 85–96 (1968).