

# Méthodes de Monte Carlo pour les milieux discontinus

Antoine Lejay

Projet OMEGA

INRIA Lorraine/Institut Élie Cartan

## Objectifs

Développer des méthodes de Monte Carlo pour résoudre

$$\begin{cases} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = Lu(t, x) \text{ sur } (0, T] \times (D^+ \cup D^-), \\ \left\langle n^+, A_{i,j}^+(x) \frac{\partial u(t, x+)}{\partial x_j} \right\rangle = \left\langle n^-, A_{i,j}^-(x) \frac{\partial u(t, x-)}{\partial x_j} \right\rangle \text{ sur } (0, T] \times S \end{cases}$$

avec  $S = \partial D^+ = \partial D^-$  et

$$L = \frac{1}{2} a_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + b_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad \text{ou} \quad L = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) + b_i \frac{\partial}{\partial x_i}$$

$a$  et  $b$  sont réguliers sur  $D^+ \cup D^-$ , et discontinus sur  $S$

- Problèmes :** 1/ Comprendre le comportement du processus  $X$  engendré par  $L$  lorsqu'il atteint  $S$   
2/ Développer des méthodes de Monte Carlo

Réponses à 1/ et 2/ dans le cas de la dimension  $d = 1$

## Quelques applications

- Pression dans un milieu poreux  $\rightsquigarrow \frac{\partial p(t, x)}{\partial t} = \operatorname{div}(a \nabla p(t, x))$  (loi de Darcy)

Le coefficient  $a$  est en général discontinu (fissures, roches différentes, ...) et très hétérogène à toutes les échelles

- Homogénéisation :  $a$  périodique et très hétérogène

$$\text{calcul du coefficient effectif : } \bar{a}_{i,j} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mathbb{E}[X_t^i X_t^j]}{t}$$

- Diffusion dans les milieux fissurés  $\rightsquigarrow$  condition de flux
- Magnéto-encéphalographie : problème de la reconstitution du cerveau (discontinuité à l'interface entre le cerveau et le liquide céphalo-rachidien)
- quantité d'autres modèles physiques

## Ce que l'on regarde...

$$d = 1, \quad L = \frac{\rho}{2} \frac{d}{dx} \left( a \frac{d}{dx} \right) + b \frac{d}{dx},$$

$a$ ,  $\rho$  et  $b$  discontinus en un ensemble de points  $\mathcal{I} = \{x_i\}_i$ , réguliers ailleurs

$$u \text{ solution de } \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = Lu(t, x) \text{ et } u(0, x) = f(x)$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} u(0, x) = f(x) \\ \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \frac{a\rho}{2} \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2} + \left( \frac{\rho a'}{2} + b \right) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} \text{ sur } ]x_i, x_{i+1}[ \\ a(x_{i+}) \frac{\partial u(t, x_{i+})}{\partial x} = a(x_{i-}) \frac{\partial u(t, x_{i-})}{\partial x} \quad (\text{conditions de transmission}) \end{cases}$$

Comportement des trajectoires lorsqu'elles atteignent l'un des points de  $\mathcal{I}$ ?

## Quelques remarques...

- le comportement de la trajectoire ne dépend que **localement** des coefficients  
⇒ on suppose que  $\mathcal{I} = \{0\}$
- on peut ajouter des conditions au bord (Dirichlet, Neumann)
- en jouant sur les coefficients  $a$  et  $\rho$ , on peut supposer n'importe quelle condition de transmission  $q \nabla u(t, 0+) = \nabla u(t, 0-)$
- le terme de dérive  $b$  (convection) ne joue pas vraiment de rôle  
⇒ on suppose  $b = 0$  (dans l'approche théorique)
- on traite à la fois les **opérateurs sous forme non-divergence** ( $\rightsquigarrow$  équations différentielles stochastiques) et les **opérateurs sous forme divergence** (moins standard en probabilités)

## Méthodes de Monte Carlo

Soit  $\circ X$  le processus stochastique engendré par  $L$ ,  
 $\circ p(t, x, y)$  densité de  $X$  à l'instant  $t$ ,  $X_0 = 0$

$$u(t, x) = \mathbb{E}_x [f(X_t)] = \int_{\mathbb{R}} p(t, x, y) f(y) dy$$

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = Lu(t, x) \text{ et } u(0, x) = f(x)$$

$$\text{loi des grands nombres} \implies u(t, x) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}_t^i)$$

$\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N$  trajectoires indépendantes de  $X$

Question : Comment simuler  $\mathbf{X}^i$  ?

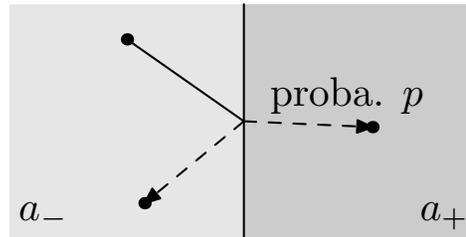
Avantages  $\circ$  ne nécessite qu'une connaissance locale du milieu  
 $\circ$  codes très courts  
 $\circ$  le temps de calcul dépend linéairement de la dimension

Inconvénients  $\circ$  converge lentement en général  
 $\circ$  ne peuvent être utilisées que pour certaines classes d'EDP

## Un cas particulier

$$L = \frac{1}{2} \operatorname{div}(a \nabla \cdot) \text{ avec } a = \begin{cases} a_+ & \text{sur } \mathbb{R}_+ \\ a_- & \text{sur } \mathbb{R}_-^* \end{cases}$$

- Une approche utilisée en géophysique : discontinuité  $\equiv$  barrière perméable

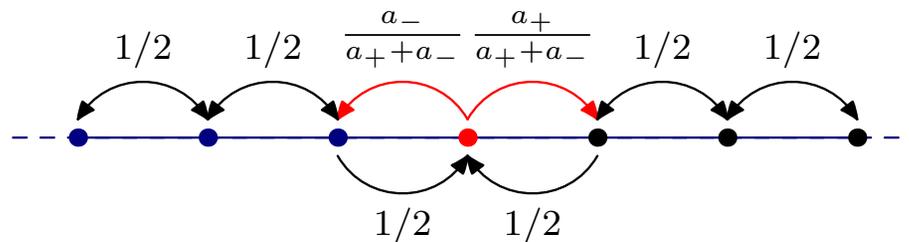


$$p = \frac{\sqrt{a_+}}{\sqrt{a_+} + \sqrt{a_-}}$$

- Discrétisation de l'opérateur

$$Lu = f \implies \begin{cases} \frac{1}{2}u\left(\frac{k}{n} + \frac{1}{n}\right) + \frac{1}{2}u\left(\frac{k}{n} - \frac{1}{n}\right) - u\left(\frac{k}{n}\right) = f\left(\frac{k}{n}\right) n^{-2}, & k \neq 0 \\ \frac{a_+}{a_+ + a_-}u\left(\frac{1}{n}\right) + \frac{a_-}{a_+ + a_-}u\left(-\frac{1}{n}\right) - u(0) = \frac{f(0)}{n^2(a_+ + a_-)} \end{cases}$$

$$\iff (I - \pi)u = \hat{f}, \quad \pi \text{ matrice de transition d'une chaîne de Markov}$$



- Une approche utilisée en géophysique

$$\forall t \geq 0, \quad \mathbb{P}_0 [X_t \geq 0] = \frac{\sqrt{a_+}}{\sqrt{a_+} + \sqrt{a_-}}$$

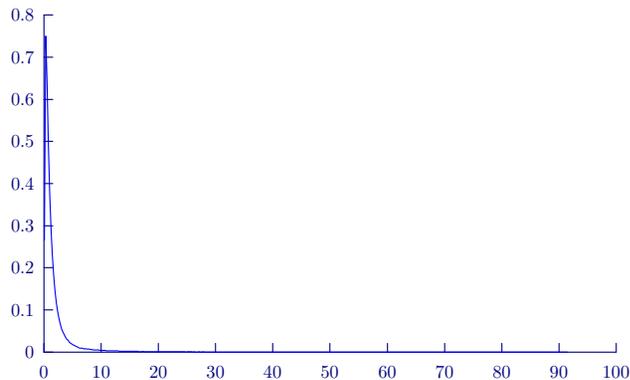
on ne tient pas compte de la répartition spatiale

- Discrétisation de l'opérateur

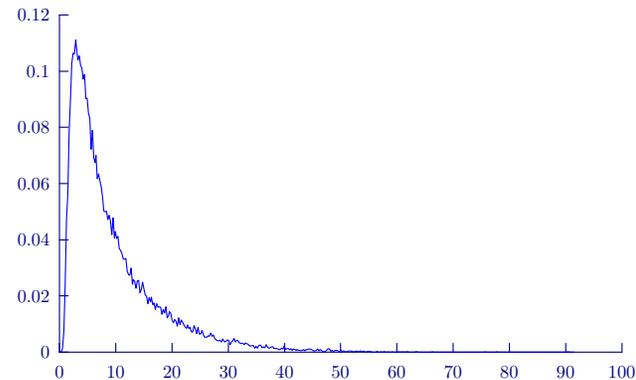
$$\mathbb{P}_0 [\text{atteindre } \rho \text{ avant d'atteindre } -\rho] = \frac{a_+}{a_+ + a_-}$$

on ne tient pas compte du temps mis pour atteindre  $\{-\rho, \rho\}$

Exemple  $a_- = 1, a_+ = 10, \rho = 1$



Densité du temps d'atteinte de  $\rho$   
conditionnellement à ne pas atteindre  $-\rho$



Densité du temps d'atteinte de  $-\rho$   
conditionnellement à ne pas atteindre  $\rho$

## Une description du comportement des trajectoires

$$L = \frac{\rho}{2} \operatorname{div}(a \nabla \cdot), \quad a = a_+ \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+} + a_- \mathbf{1}_{\mathbb{R}_-} \quad \rho = \rho_+ \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+} + \rho_- \mathbf{1}_{\mathbb{R}_-}$$

$$X_t = x + \int_0^t \sqrt{\rho(X_s) a(X_s)} dB_s + \beta \ell_t(X), \quad \beta = \frac{a_+ - a_-}{a_+ + a_-} \in [-1, 1]$$

$$\ell_t(X) \stackrel{\text{d\u00e9f}}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \int_0^t \mathbf{1}_{\{X_s \in [-\varepsilon, \varepsilon]\}} ds$$

**temps local** en 0 du processus  $X$

$\rightsquigarrow$  processus continu croissant, qui ne cro\u00eet qu'aux instants tels que  $X_t = 0$  (ensemble de mesure de Lebesgue nulle)

$\rightsquigarrow$  « force » le processus \u00e0 aller de pr\u00e9f\u00e9rence du c\u00f4t\u00e9 sur  $\mathbb{R}_+$  si  $\beta > 0$  et sur  $\mathbb{R}_-$  si  $\beta < 0$

**Probl\u00e8me** : Comment d\u00e9crire rigoureusement l'influence du temps local (et de fa\u00e7on utilisable num\u00e9riquement) ?

**Un cas particulier :**  
**le mouvement brownien biaisé**  
**(de paramètre  $(\gamma + 1)/2$ )**

$$X_t = x + B_t + \gamma \ell_t(X), \quad \gamma \in [-1, 1]$$

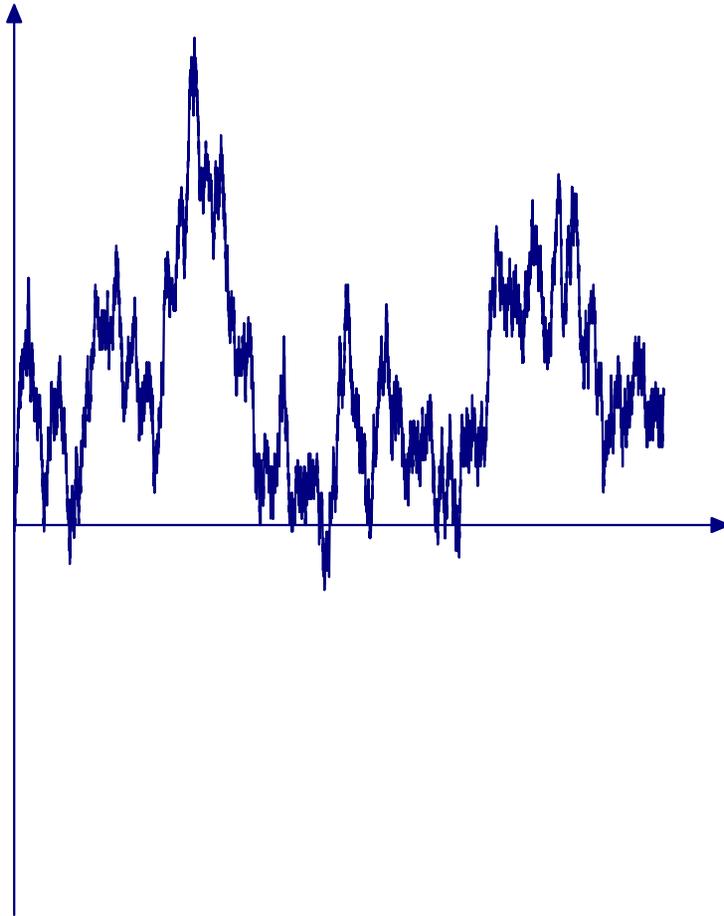
$\gamma = \pm 1 \rightsquigarrow X \stackrel{\text{loi}}{=} \pm |B|$  mvt brownien réfléchi (positivement ou négativement)

$\gamma = 0 \rightsquigarrow$  mvt brownien

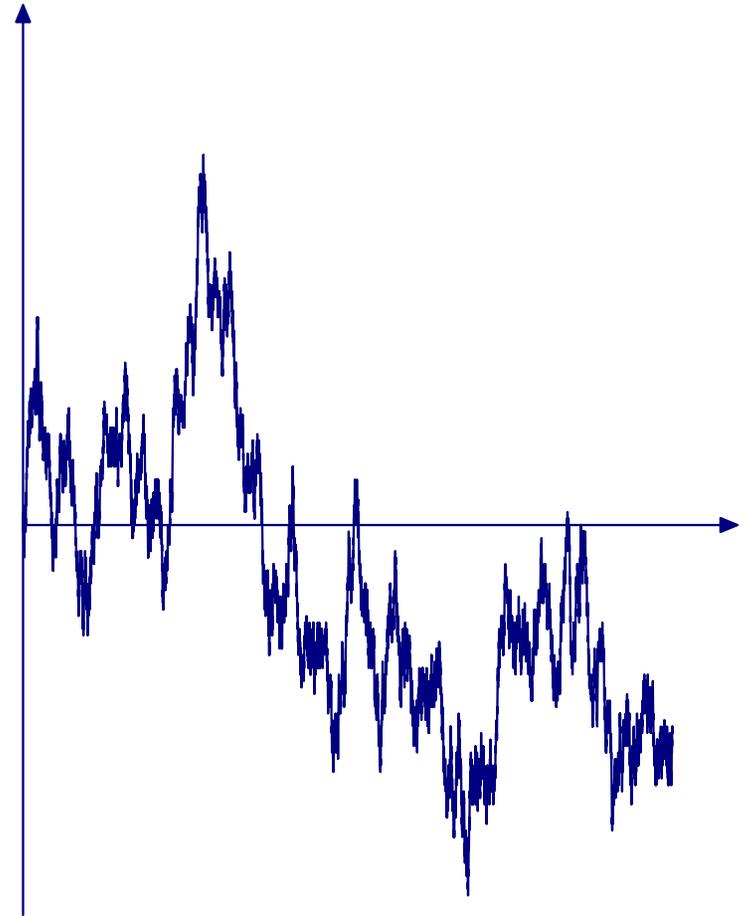
Formellement, le générateur infinitésimal de  $X$  est  $L = \frac{1}{2} \Delta + \gamma \delta_0 \nabla$  et

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = Lu(t, x) \iff \begin{cases} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta u(t, x) \text{ sur } \mathbb{R} \setminus \{0\} \\ (1 + \gamma) \nabla u(t, 0+) = (1 - \gamma) \nabla u(t, 0-) \end{cases}$$

Il existe de nombreuses façons de construire ce processus

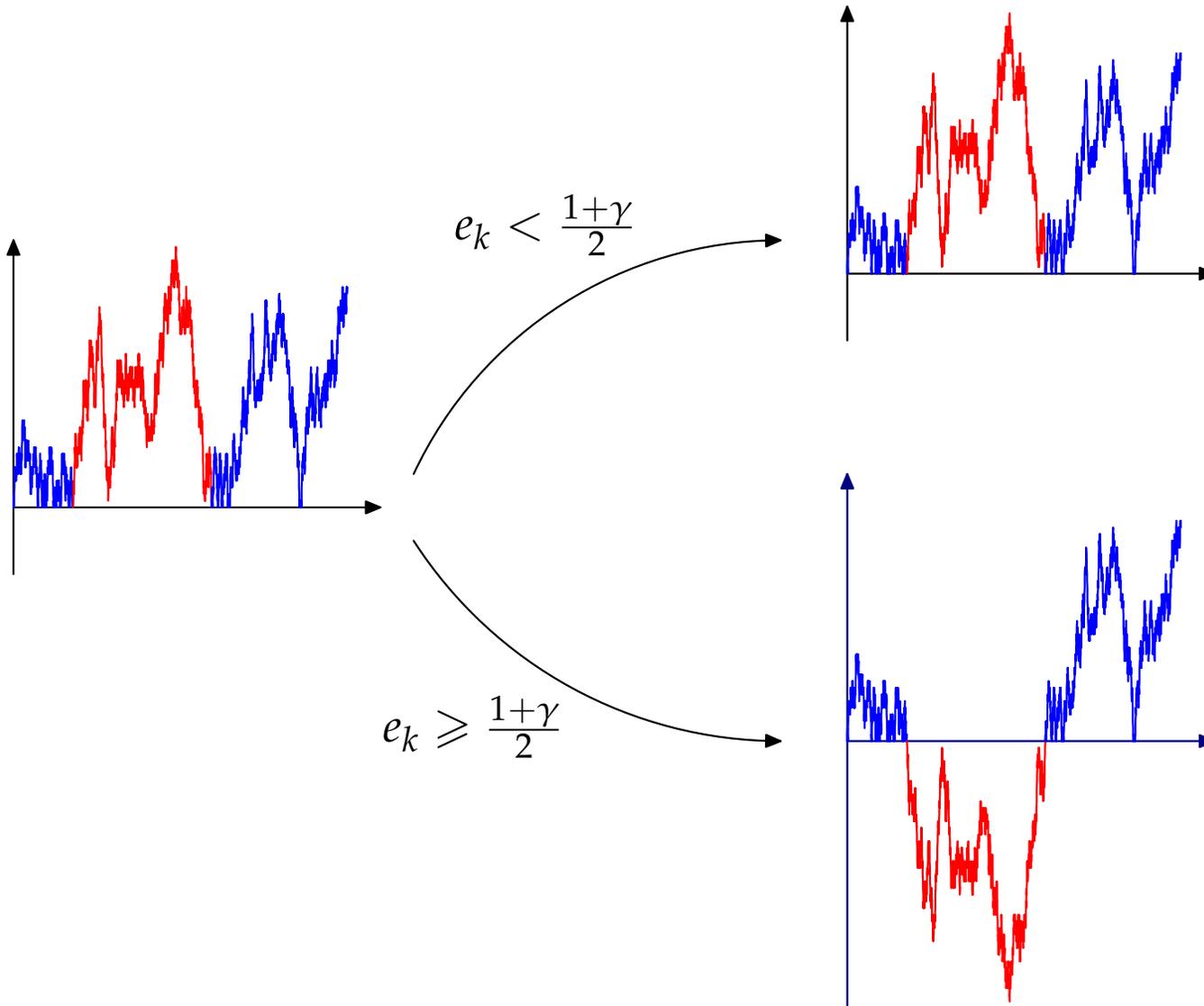


Mouvement brownien biaisé  
de paramètre  $(\gamma + 1)/2 = 0,8$



Mouvement brownien  
(=MB biaisé de paramètre 0,5)

## Une construction

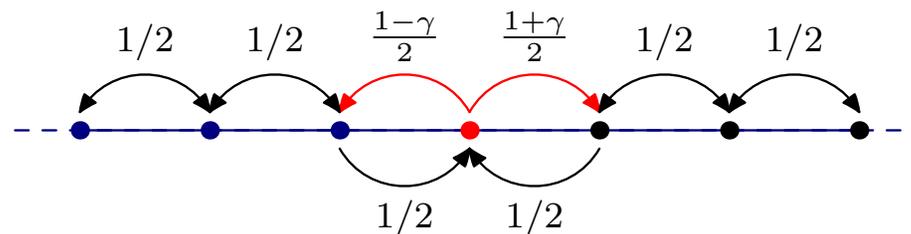


## Quelques propriétés

- $\mathbb{P}_0 [\text{atteindre } \rho \text{ avant d'atteindre } -\rho] = \frac{1 + \gamma}{2}$
- la loi du temps d'atteinte de  $\{-\rho, \rho\}$  ne dépend pas de  $\gamma$  (c'est celle du mouvement brownien)
- $n^{-1}S_{\lfloor n^2 t \rfloor} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\text{loi}} X_t$ ,  
 $(S_n)_{n \in \mathbb{N}}$  marche aléatoire sur  $\mathbb{Z}$

$$k \neq 0, \quad \mathbb{P}[S_{n+1} = k \pm 1 \mid S_n = k] = \frac{1}{2}$$

$$\mathbb{P}[S_{n+1} = 1 \mid S_n = 0] = \frac{\gamma + 1}{2}$$



## Une transformation simple

$$a = a_+ \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+} + a_- \mathbf{1}_{\mathbb{R}_-}, \quad \rho = \rho_+ \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+} + \rho_- \mathbf{1}_{\mathbb{R}_-}$$

$L = \frac{\rho}{2} \operatorname{div}(a \nabla \cdot) \rightsquigarrow X$  processus stochastique solution de

$$X_t = x + \int_0^t \sqrt{\rho(X_s) a(X_s)} dB_s + \beta \ell_t(X), \quad \beta = \frac{a_+ - a_-}{a_+ + a_-} \in [-1, 1]$$

$$Y \stackrel{\text{d\u00e9f}}{=} \Phi(X) \text{ avec } \Phi(x) = \begin{cases} \frac{x}{\sqrt{\rho_+ a_+}} & \text{si } x \geq 0 \\ \frac{x}{\sqrt{\rho_- a_-}} & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

**Formule d'It\u00f4-Tanaka**  $\implies Y$  mvt brownien biais\u00e9 de param\u00e8tre  $\frac{1+\gamma}{2}$

$$\text{avec } \gamma = \frac{\sqrt{a_+/\rho_+} - \sqrt{a_-/\rho_-}}{\sqrt{a_+/\rho_+} + \sqrt{a_-/\rho_-}}$$

**Rem. :**  $\mathbb{P}_0 [Y_t \geq 0] = \mathbb{P}_0 [X_t \geq 0] = \frac{1+\gamma}{2}$

**Rem. :** On peut ajouter un terme de convection. Dans ce cas,  $\Phi$  n'est plus lin\u00e9aire par morceaux

## Simulation : Variation de la méthode de marche aléatoire sur les sphères

A. Lejay & M. Martinez

$$L = \frac{\rho}{2} \frac{d}{dx} \left( a \frac{d}{dx} \right) \rightsquigarrow L^n = \frac{\rho^n}{2} \frac{d}{dx} \left( a^n \frac{d}{dx} \right), \quad a^n \text{ et } \rho^n \text{ constants par morceaux}$$
$$\rightsquigarrow \widehat{L}^n = \frac{1}{2} \Delta + \sum_k \beta_k^n \delta_{x_k^n} \nabla \quad (\text{transformation simple en espace})$$

$$\widehat{L} \text{ générateur infinitésimal de } Z_t = x + B_t + \sum_k \beta_k \ell_t^{x_k^n}(Z)$$

(Rem. : on peut faire entrer un terme de convection dans  $\rho$  et  $a$ , car  $d = 1$ )

○ Si  $Z_t = x_k^n$ , on fixe

$$x_{k-1}^n \leq x_k^{n,-} < x_k^n < x_k^{n,+} \leq x_{k+1}^n \text{ t.q. } x_k^n - x_k^{n,-} = x_k^{n,+} - x_k^n$$

et on simule  $(\tau, Z_\tau)$  où  $\tau = \inf \left\{ s \geq 0 \mid Z_s \in \{ x_k^{n,+}, x_k^{n,-} \} \right\}$

$$(t, z) \leftarrow (t + \tau, Z_\tau)$$

○ Si  $Z_t = z \in ]x_{k-1}^n, x_k^n[$ , on simule  $(\tau, Z_\tau)$  où  $\tau = \inf \left\{ s \geq 0 \mid Z_s \in \{ x_{k-1}^n, x_k^n \} \right\}$

$$(t, z) \leftarrow (t + \tau, Z_\tau)$$

Rem. : Pour simuler  $Z_T$  à  $T$  fixé, il faut décider à chaque étape si  $\tau + t < T$  et conditionner proprement les lois des v.a. à simuler

## Simulation : Approximation par une marche aléatoire

P. Étoré

Approximation de la solution de l'EDS

$$Y_t = y + B_t + \int_{\mathbb{R}} \nu(dx) \ell_t^x(Y), \quad \nu \text{ mesure}$$

par une marche aléatoire établie par J.-F. Le Gall

↪ étude de la vitesse de convergence

Calculs plus simples et plus rapide que dans la méthode précédente

## Une autre approche : schéma d'Euler

M. Martinez

Par une autre transformation simple en espace  $Y = \Psi(X)$  solution de l'EDS à coefficients discontinus

$$Y_t = y + \int_0^t \sigma(Y_s) dB_s + \int_0^t c(Y_s) ds \quad (\star)$$

Convergence du schéma d'Euler

$$Y_{t+\Delta t} = Y_t + \sigma(Y_t)\xi + b(Y_t)\Delta t, \quad \xi \sim \mathcal{N}(0, \Delta t)$$

vers la solution de  $(\star)$  établie par L. Yan

↪ étude de la vitesse de convergence

**Rem. :** dans sa thèse, M. Martinez donne d'autres applications du mouvement brownien biaisé (existence de solutions d'EDS, ...), auquel il se ramène par d'autres transformations en temps et/ou en espace

## Diffusion dans un réseau de fissures

**fissures**  $\implies$  coefficient de diffusion important dans une « petite zone »

On ne peut pas toujours remplacer le milieu par un milieu homogène

Il faut parfois prendre en compte la géométrie du réseau de fissures

### Le modèle : cas imperméable

Chaque fissure est vue comme un tube très fin

Équation de diffusion dans chaque fissure  $\frac{\partial C(t, x)}{\partial t} = \nabla(a \nabla C(t, x))$

On néglige les mouvements transversaux

$\implies$  le réseau de fissures est vu comme un **graphe**

- diffusion uni-dimensionnelle sur chaque arête
- condition de flux aux nœuds :  $\sum_{e \sim v} \alpha_{v,e} \nabla_{v,e} C(t, v) = 0$

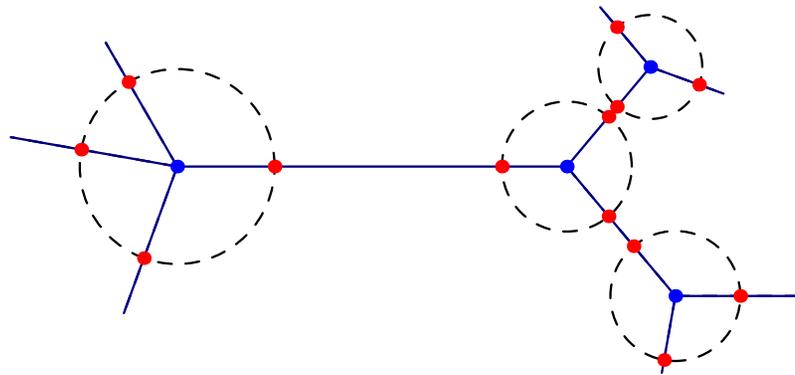
## Algorithme (cas imperméable)

On calcule : la position à l'instant  $t$

ou le temps d'atteinte de points donnés

On utilise : Variation de la méthode des *marches aléatoire sur les sphères* :

simulation du temps et de la position de sortie de certaines zones



on transforme les  $\alpha_{v,e}$  et on suppose que  $a = 1$  dans chaque arête

↪ marche aléatoire sur les points bleus et rouges (alternativement)

avec le temps proprement incrémenté

≡ « trace » de la trajectoire sur les points bleus et rouges

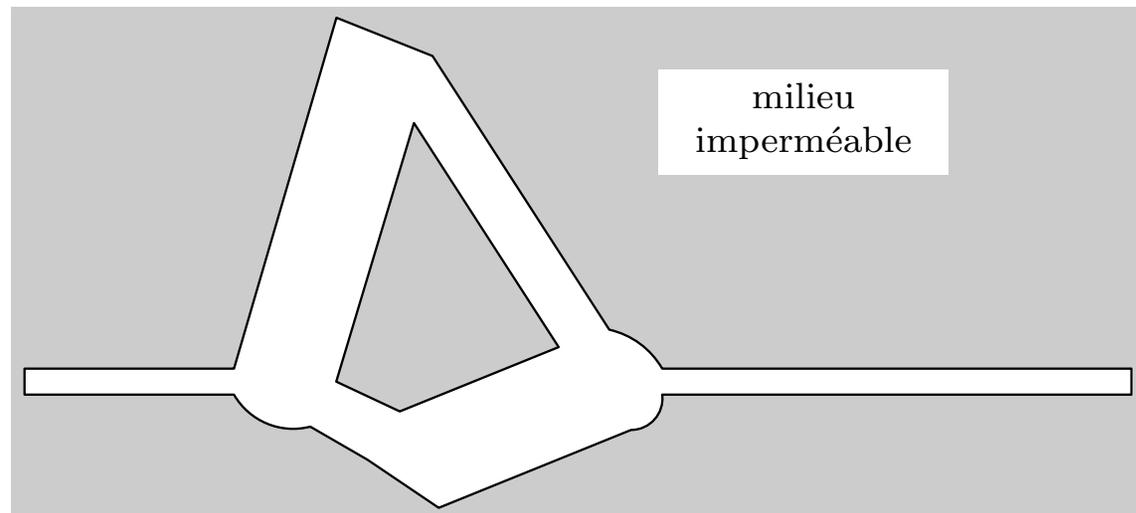
## Exemple numérique : calcul de la concentration en un point

Concentration d'un traceur dans un réseau de fissures

$$\frac{\partial C(t, x)}{\partial t} = \Delta C(t, x) + \text{condition de flux aux noeuds} \quad (\star)$$
$$\implies C(t, x) = \int_{\text{graphe}} p(t, x, y) f(y) dy \quad \text{si } C(0, x) = f(x)$$

Calcul de  $p(t, x_0, y)$  pour  $x_0$  donné (= densité des particules partant de  $x_0$ )

$\equiv$  résolution de l'éq. adjointe de  $(\star)$



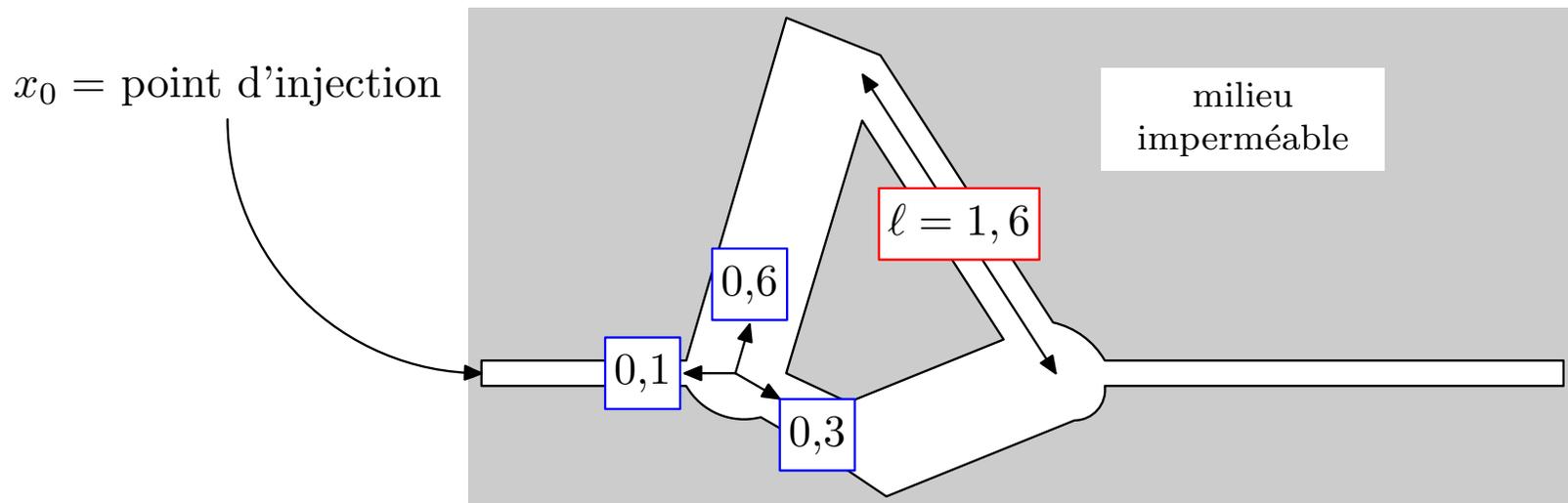
## Exemple numérique : calcul de la concentration en un point

Concentration d'un traceur dans un réseau de fissures

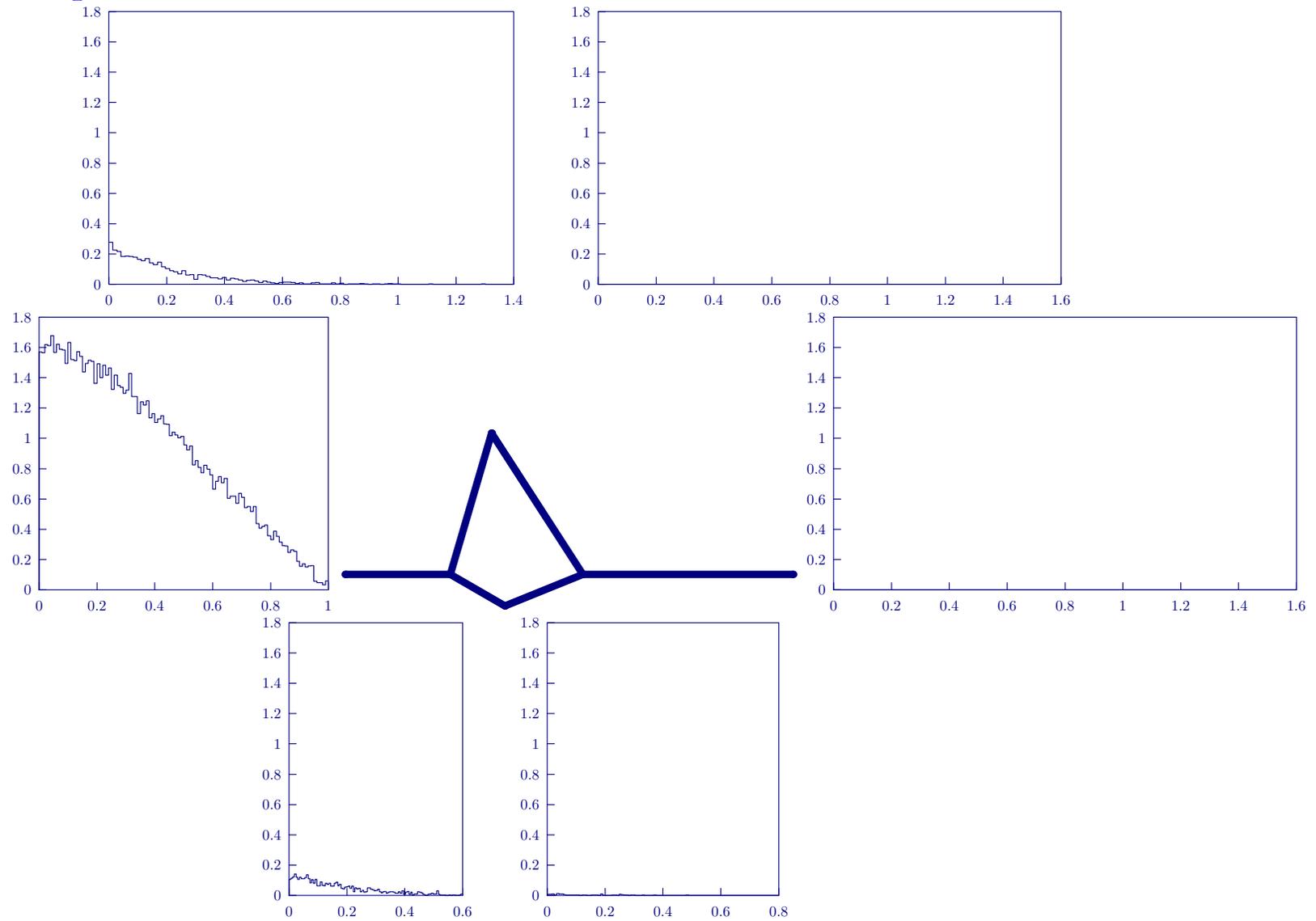
$$\frac{\partial C(t, x)}{\partial t} = \Delta C(t, x) + \text{condition de flux aux noeuds} \quad (\star)$$
$$\implies C(t, x) = \int_{\text{graphe}} p(t, x, y) f(y) dy \quad \text{si } C(0, x) = f(x)$$

Calcul de  $p(t, x_0, y)$  pour  $x_0$  donné (= densité des particules partant de  $x_0$ )

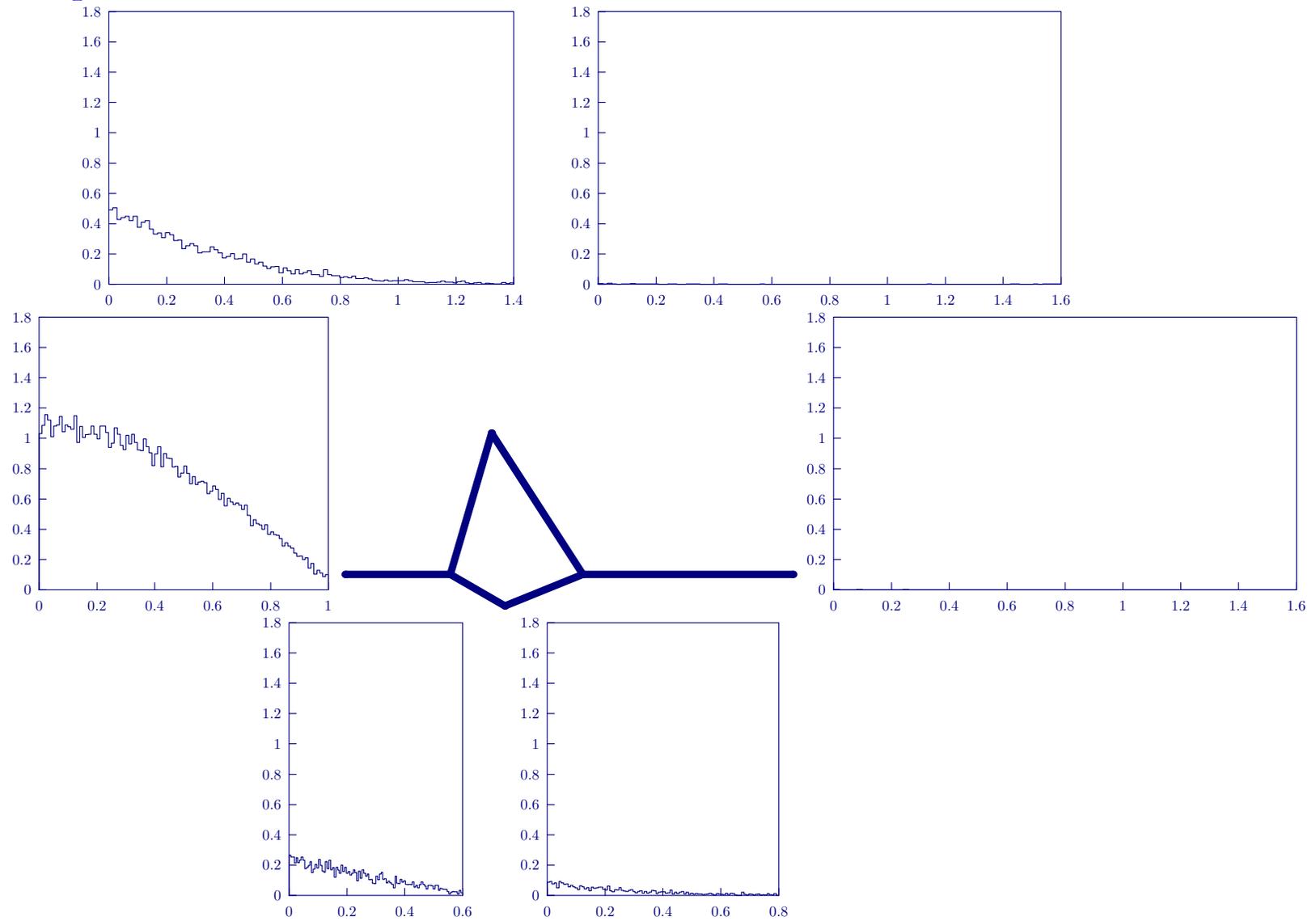
$\equiv$  résolution de l'éq. adjointe de  $(\star)$



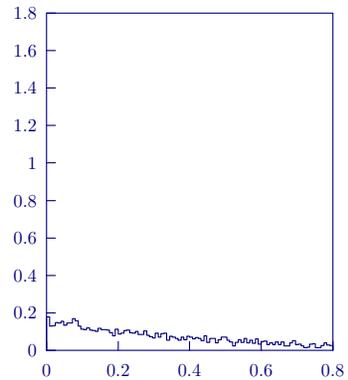
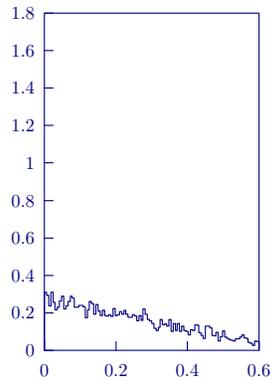
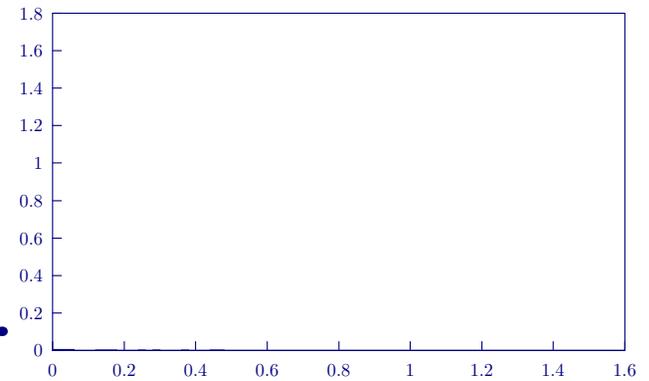
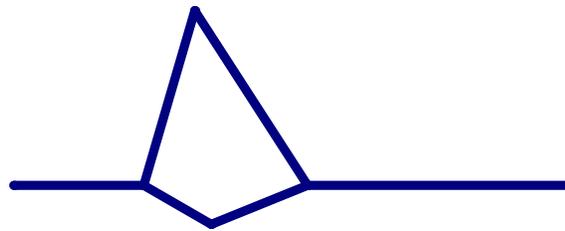
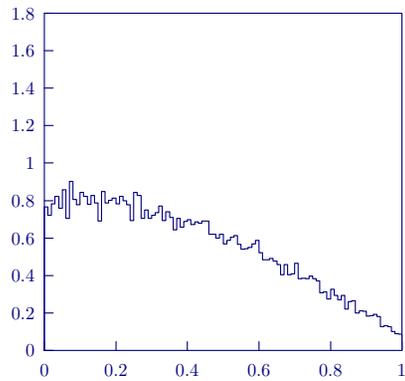
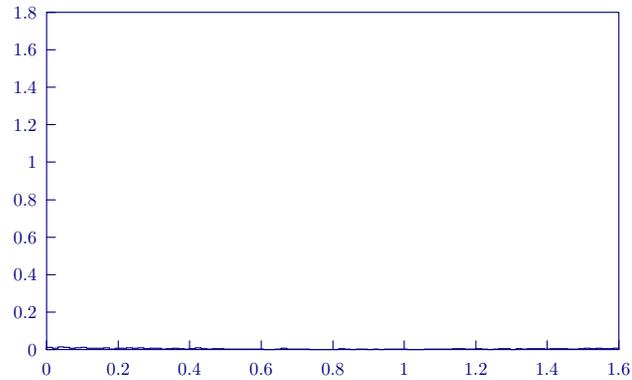
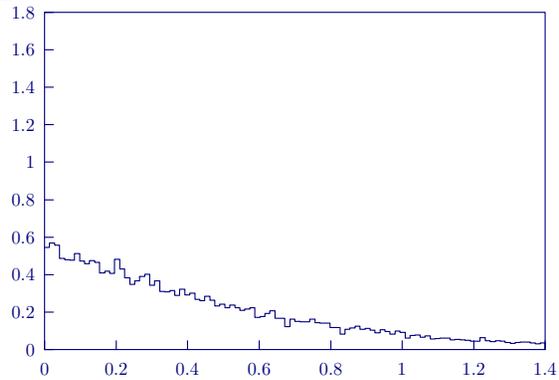
Temps=0,25



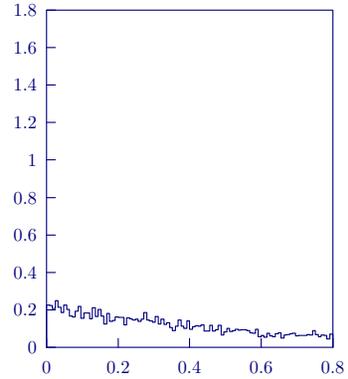
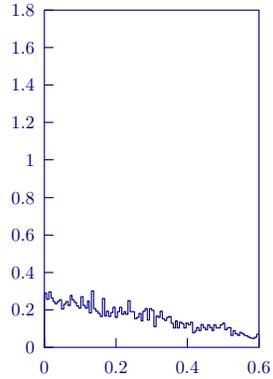
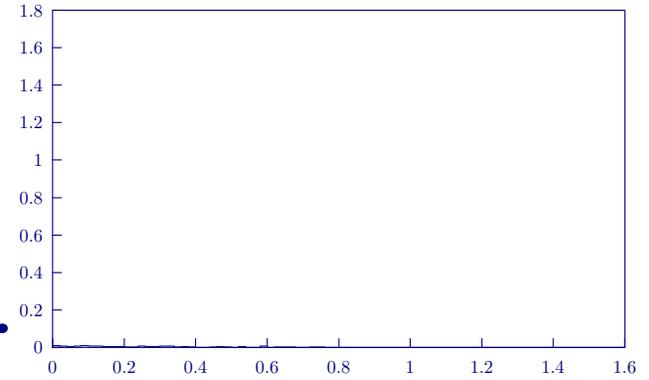
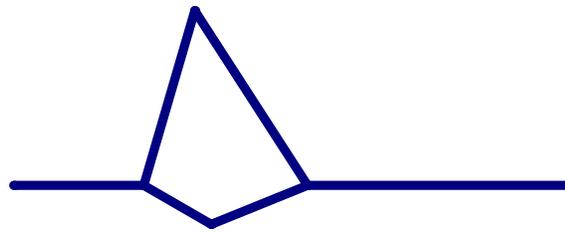
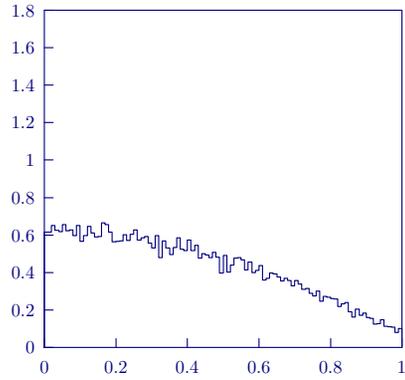
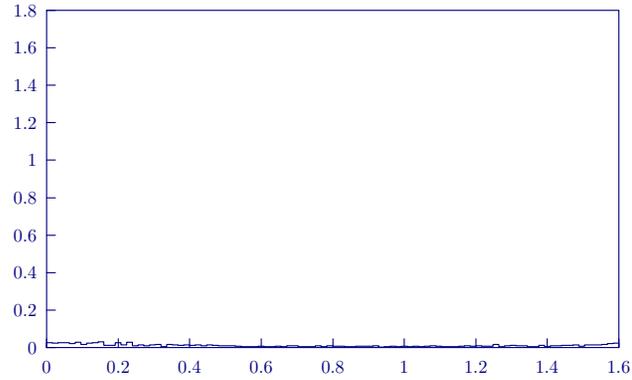
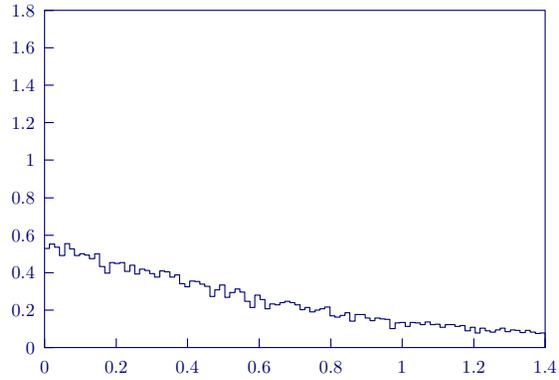
Temps=0,50



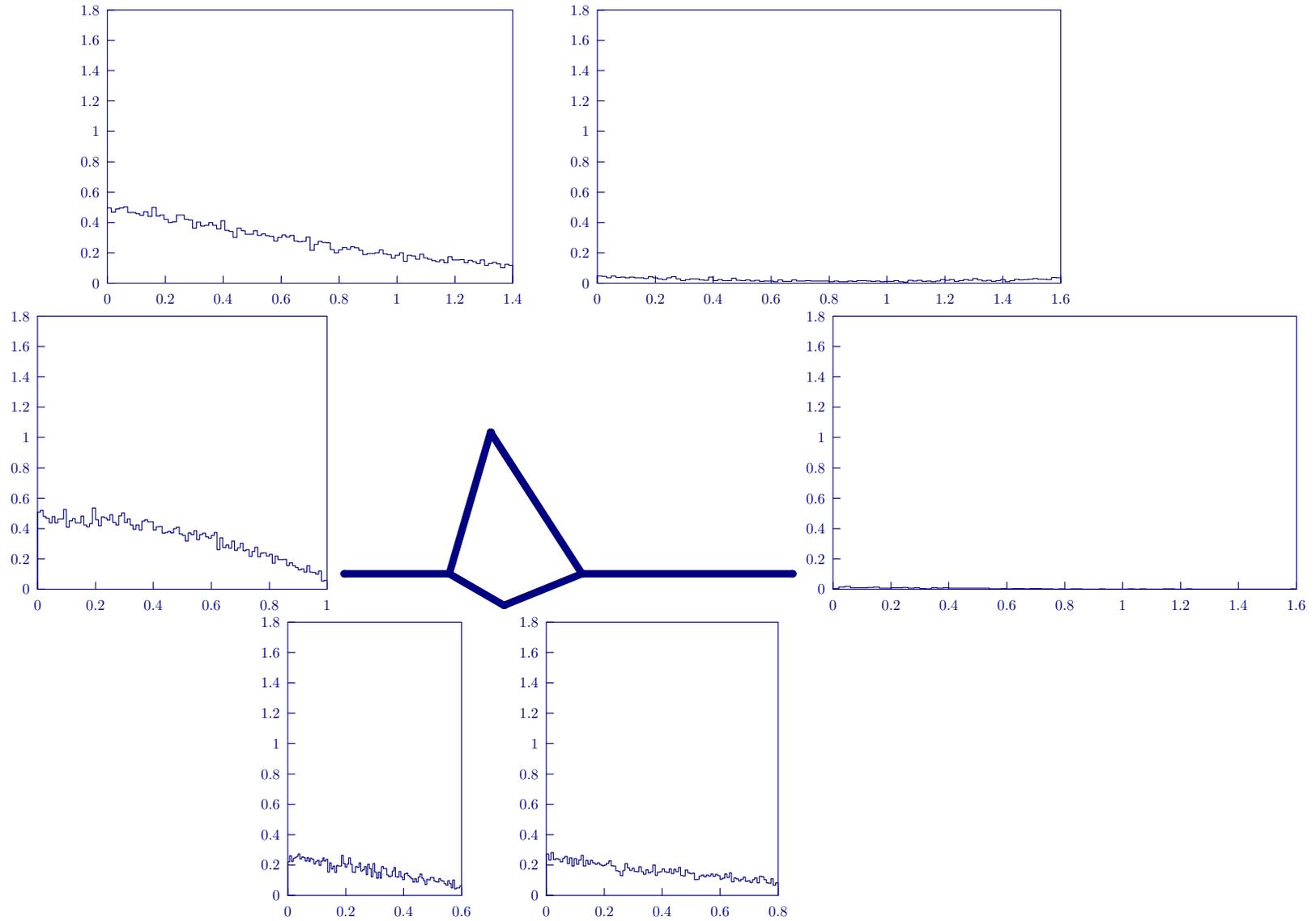
Temps=0,75



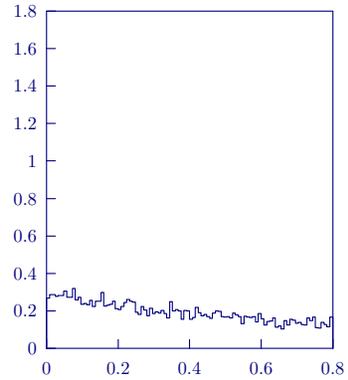
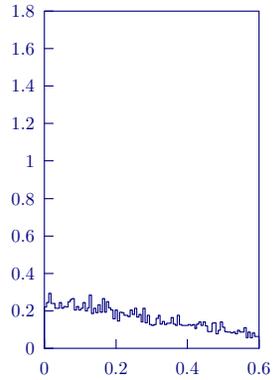
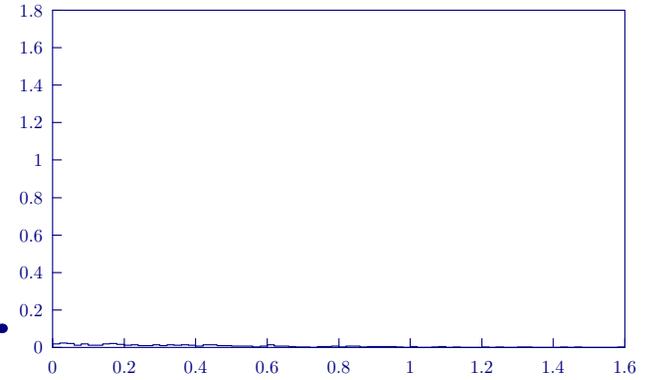
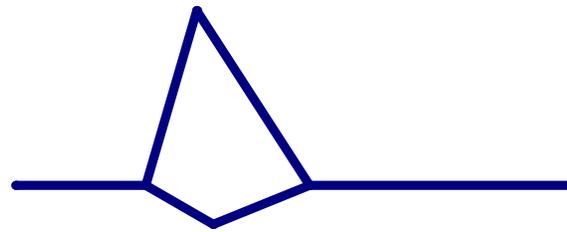
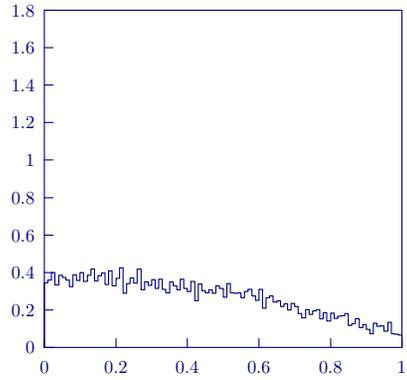
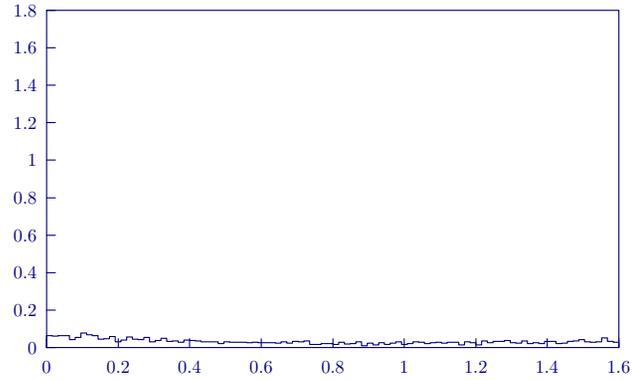
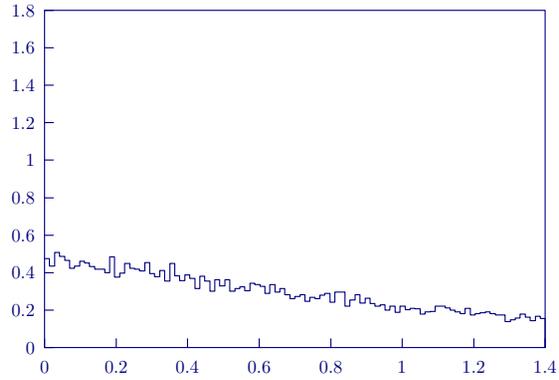
Temps=1,00



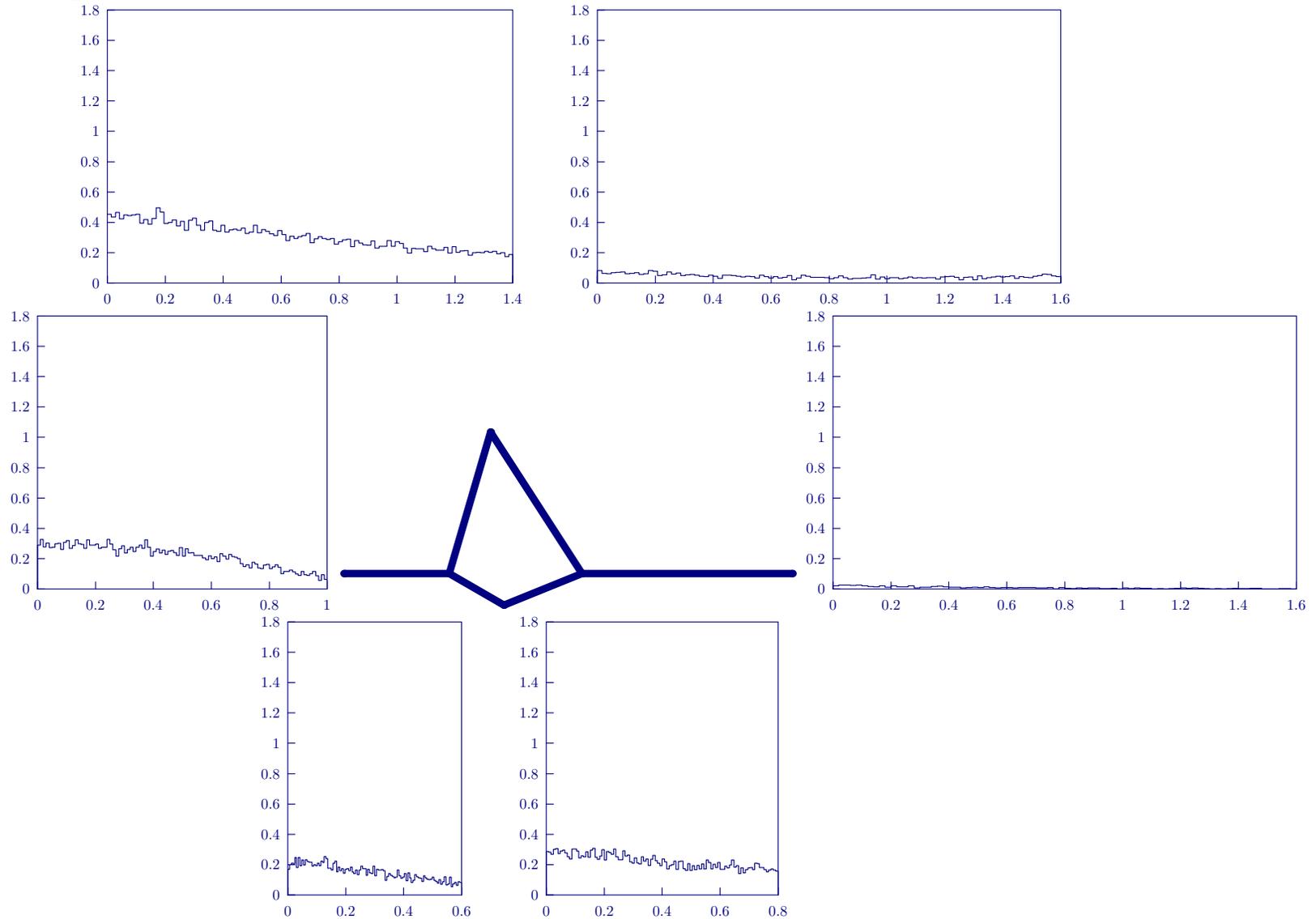
Temps=1,25



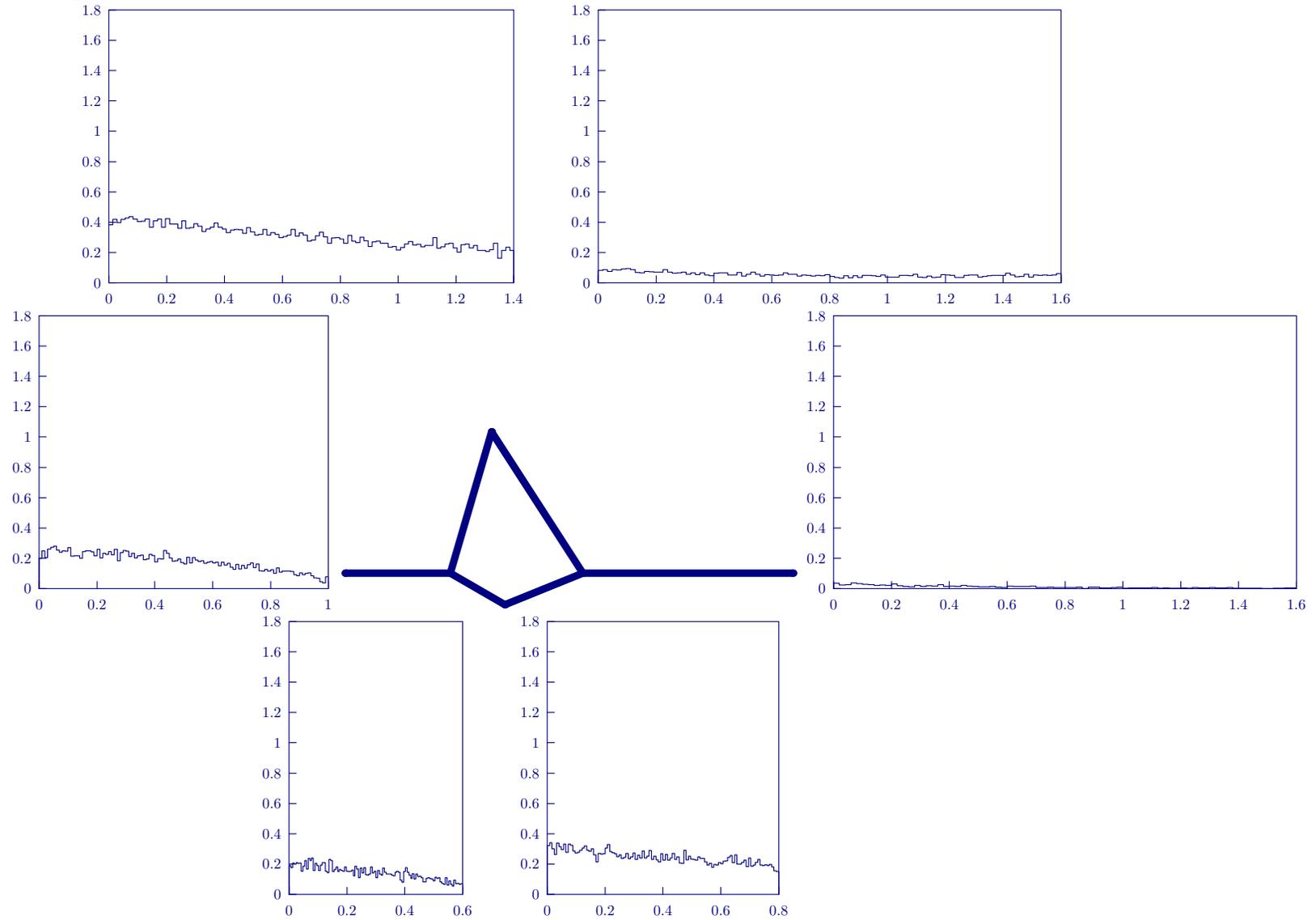
Temps=1,50



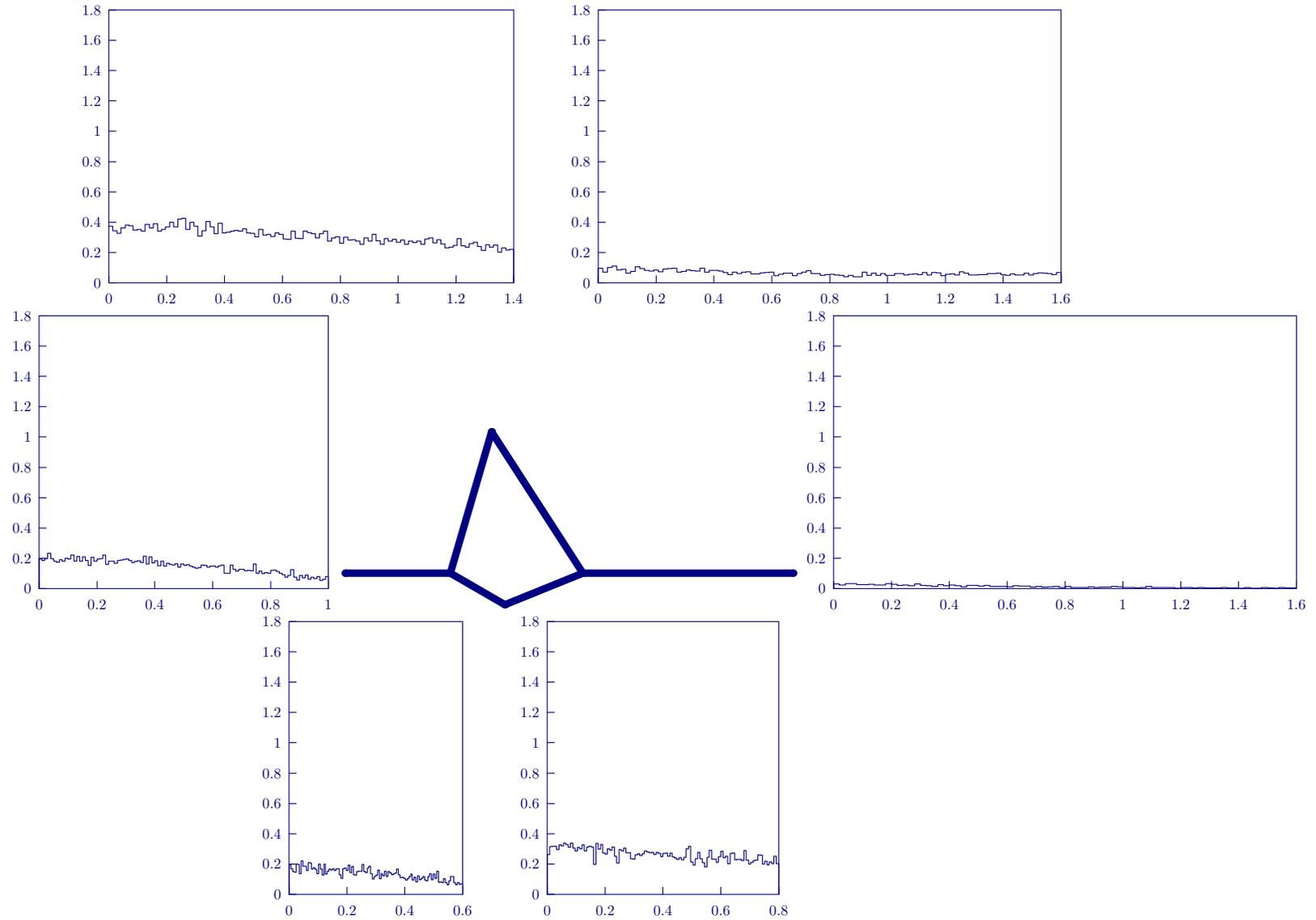
Temps=1,75



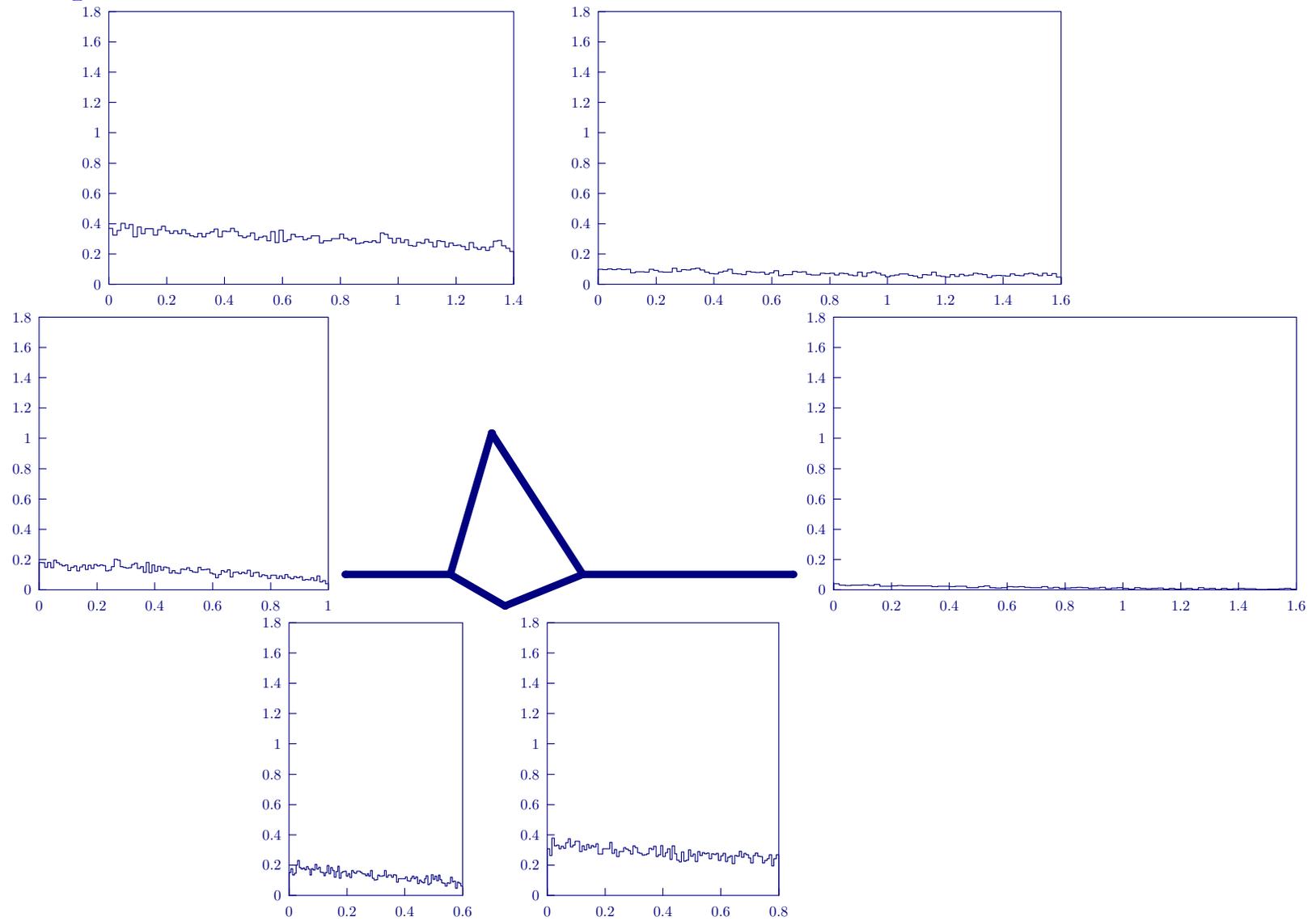
Temps=2,00



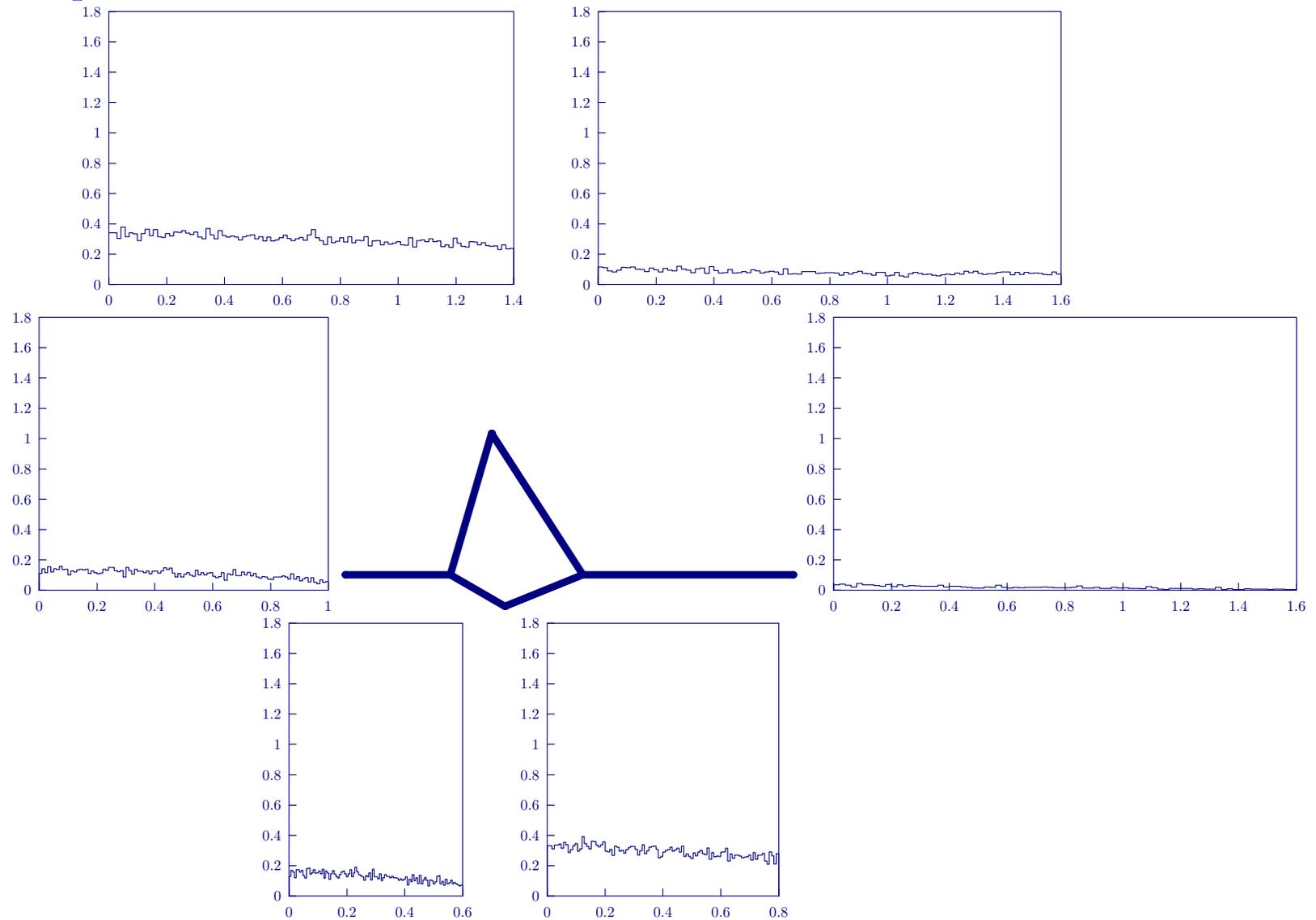
Temps=2,25



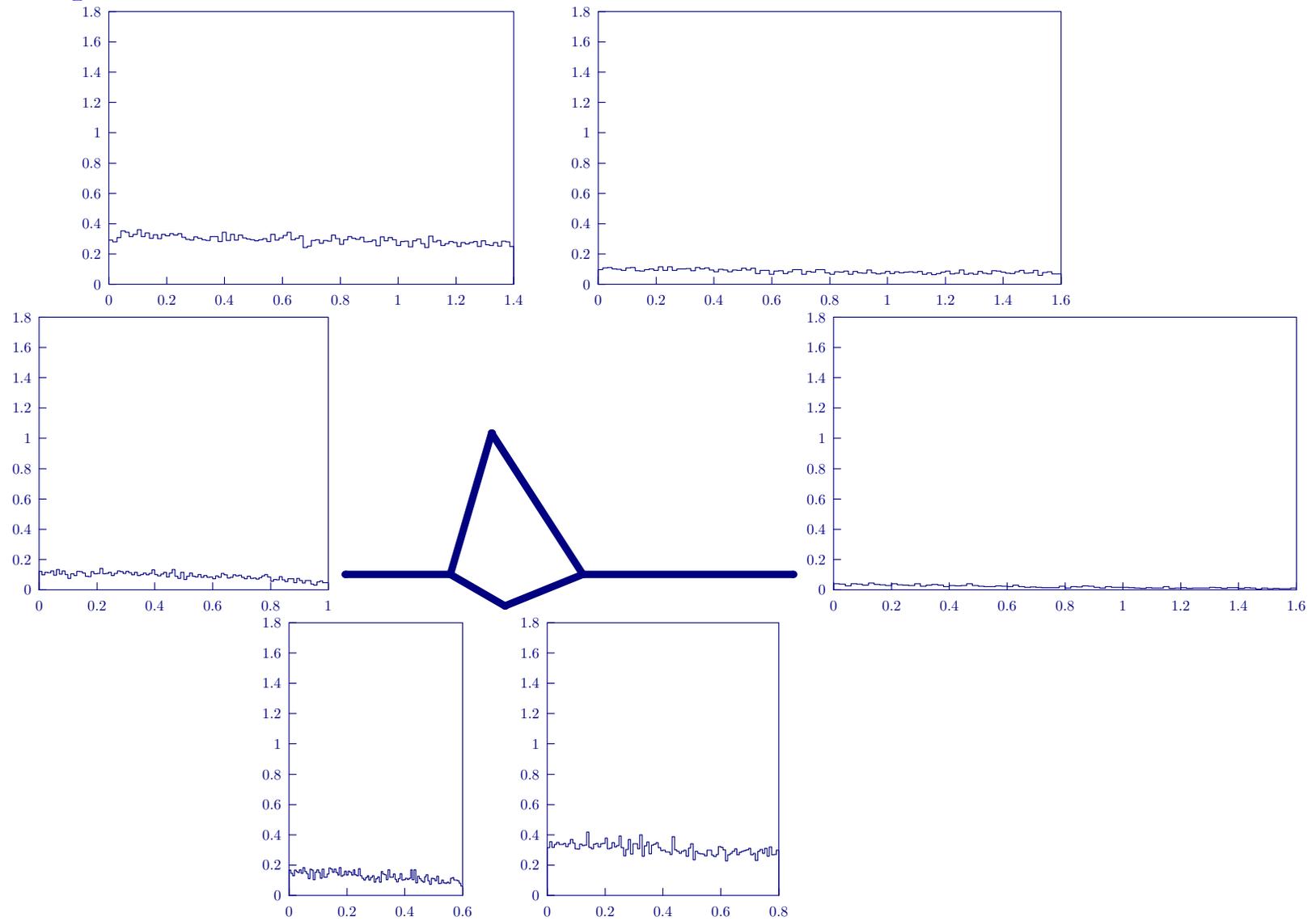
Temps=2,50



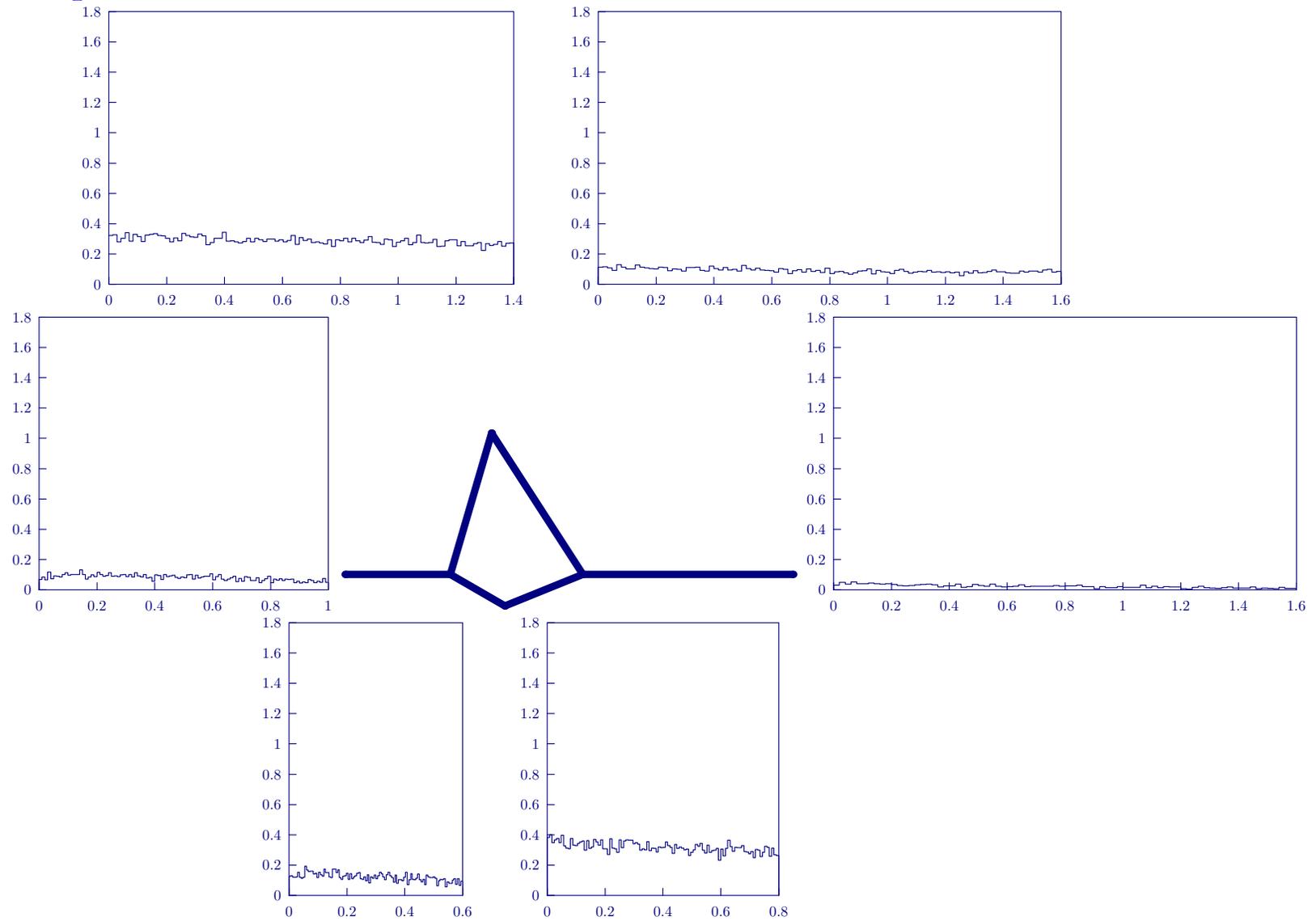
Temps=2,75



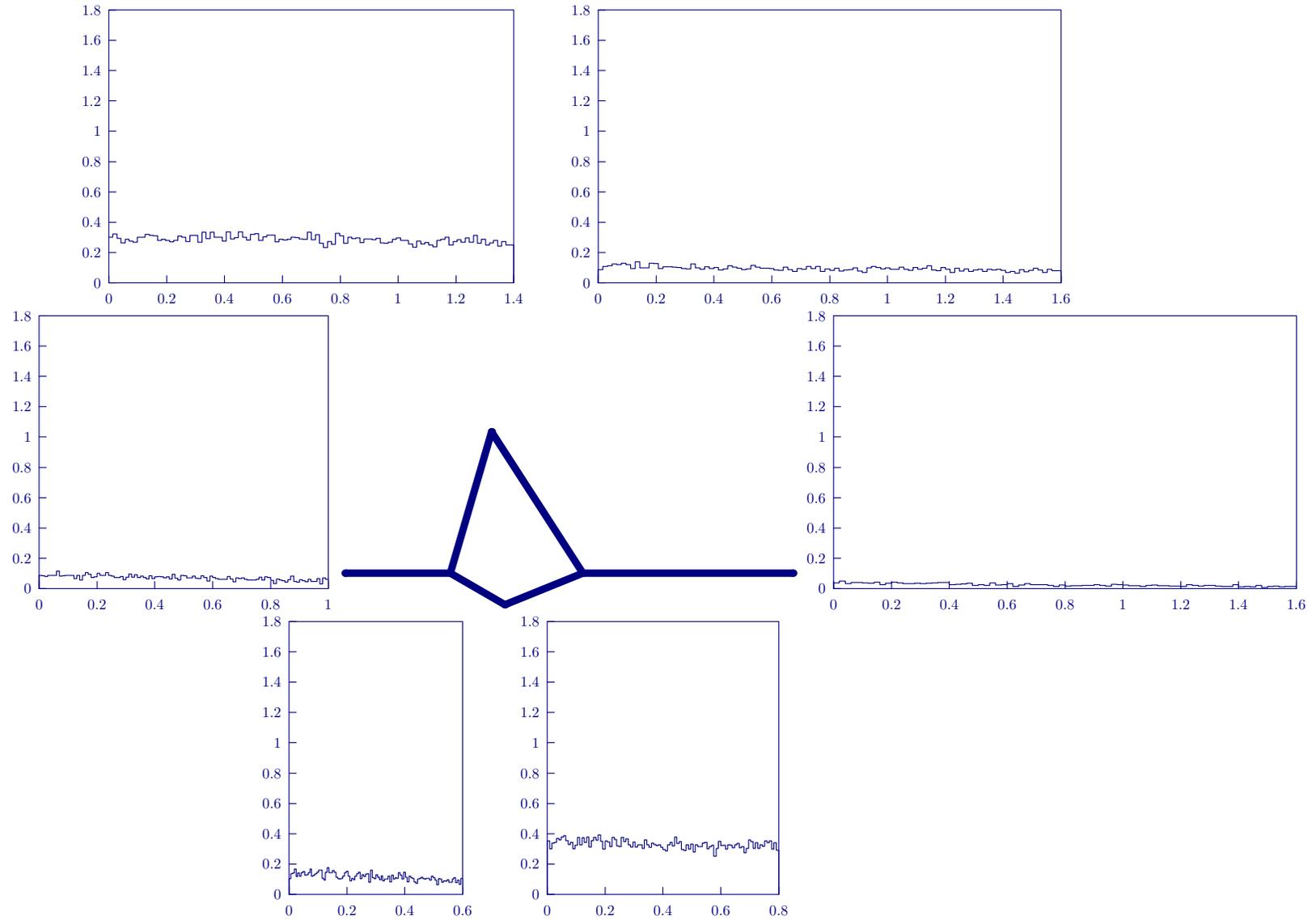
Temps=3,00



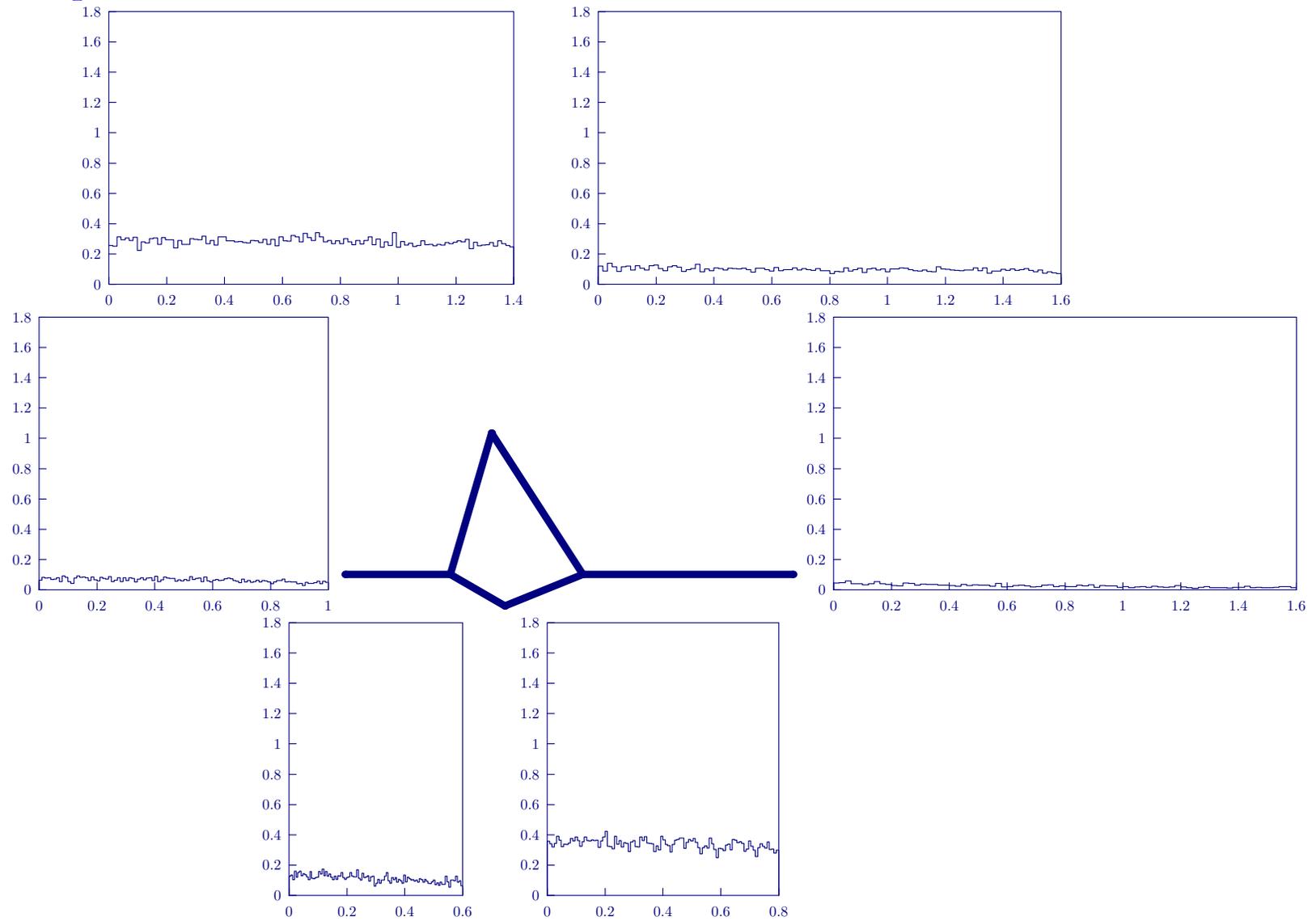
Temps=3,25



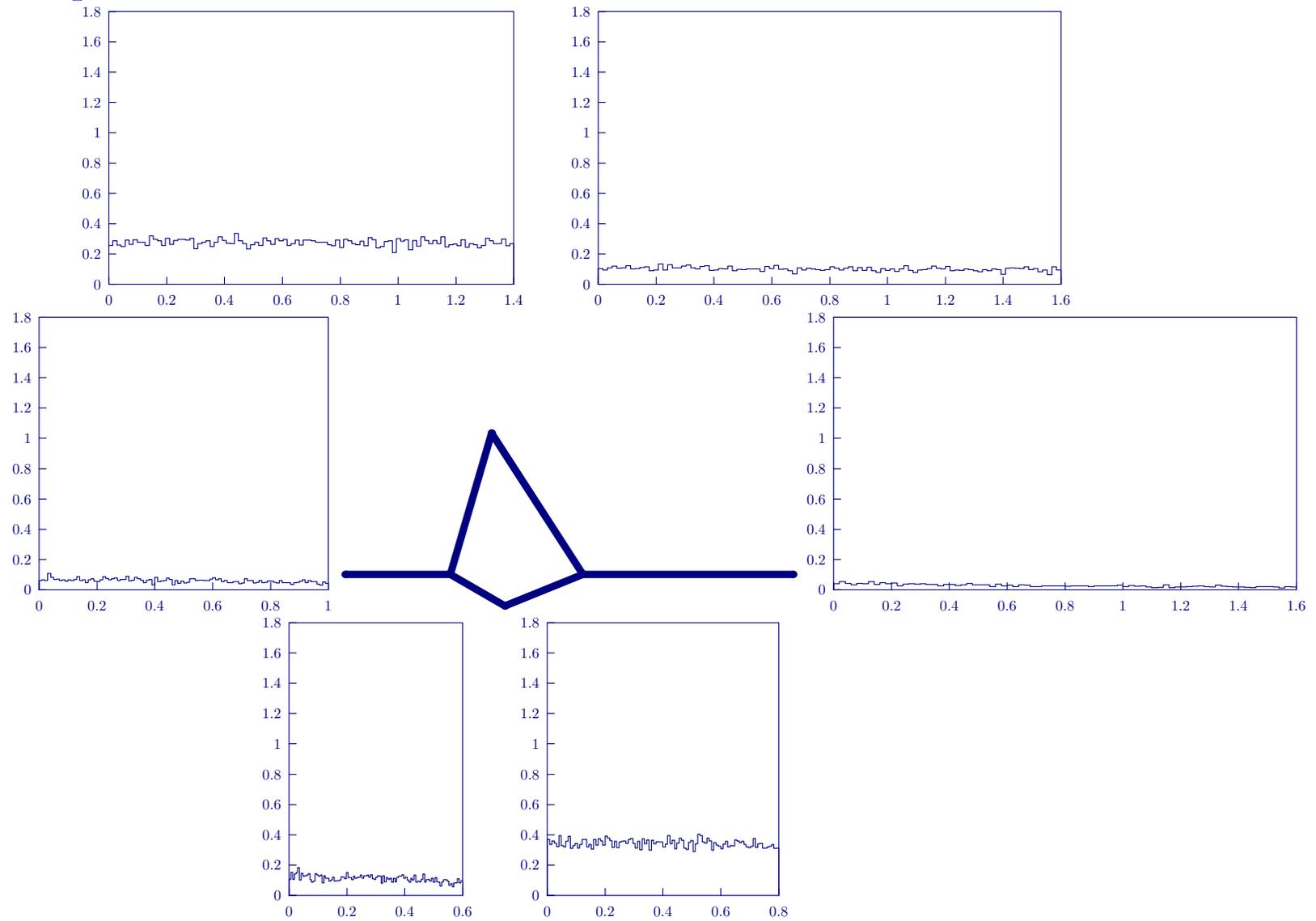
Temps=3,50



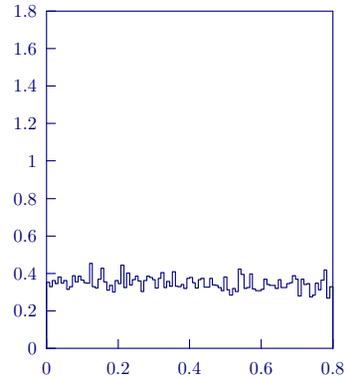
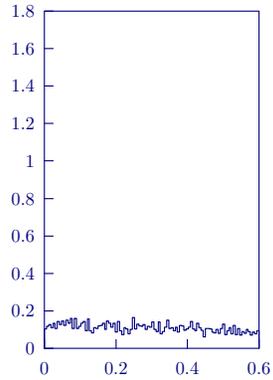
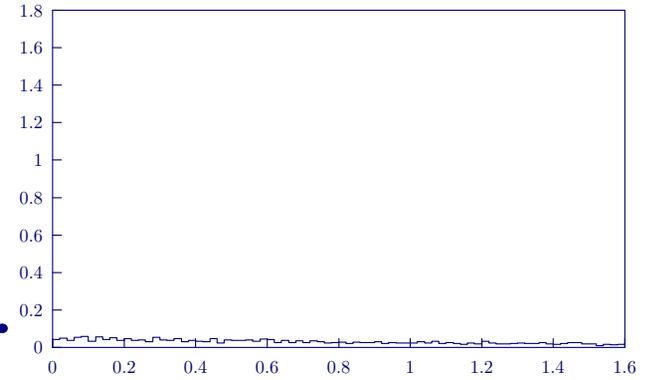
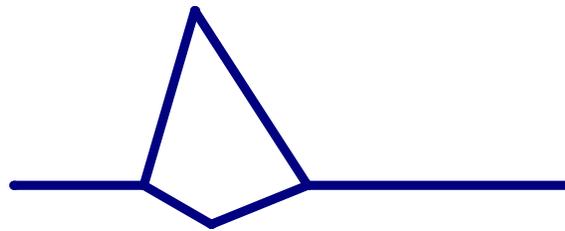
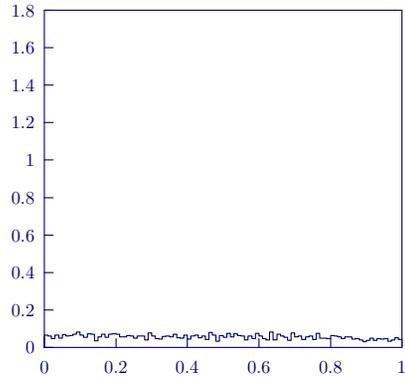
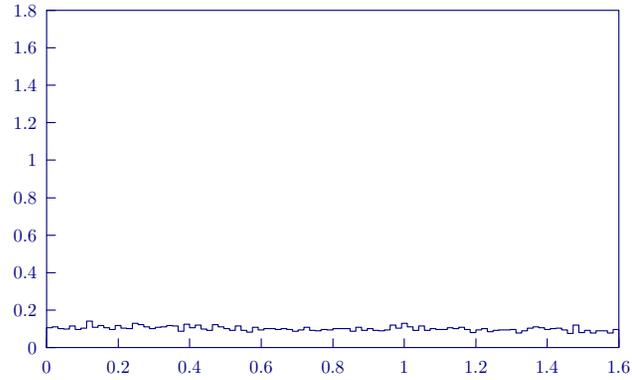
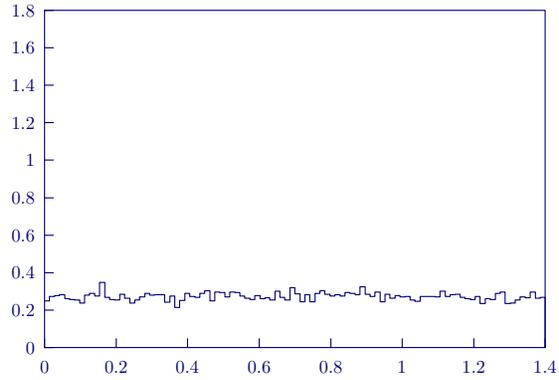
Temps=3,75



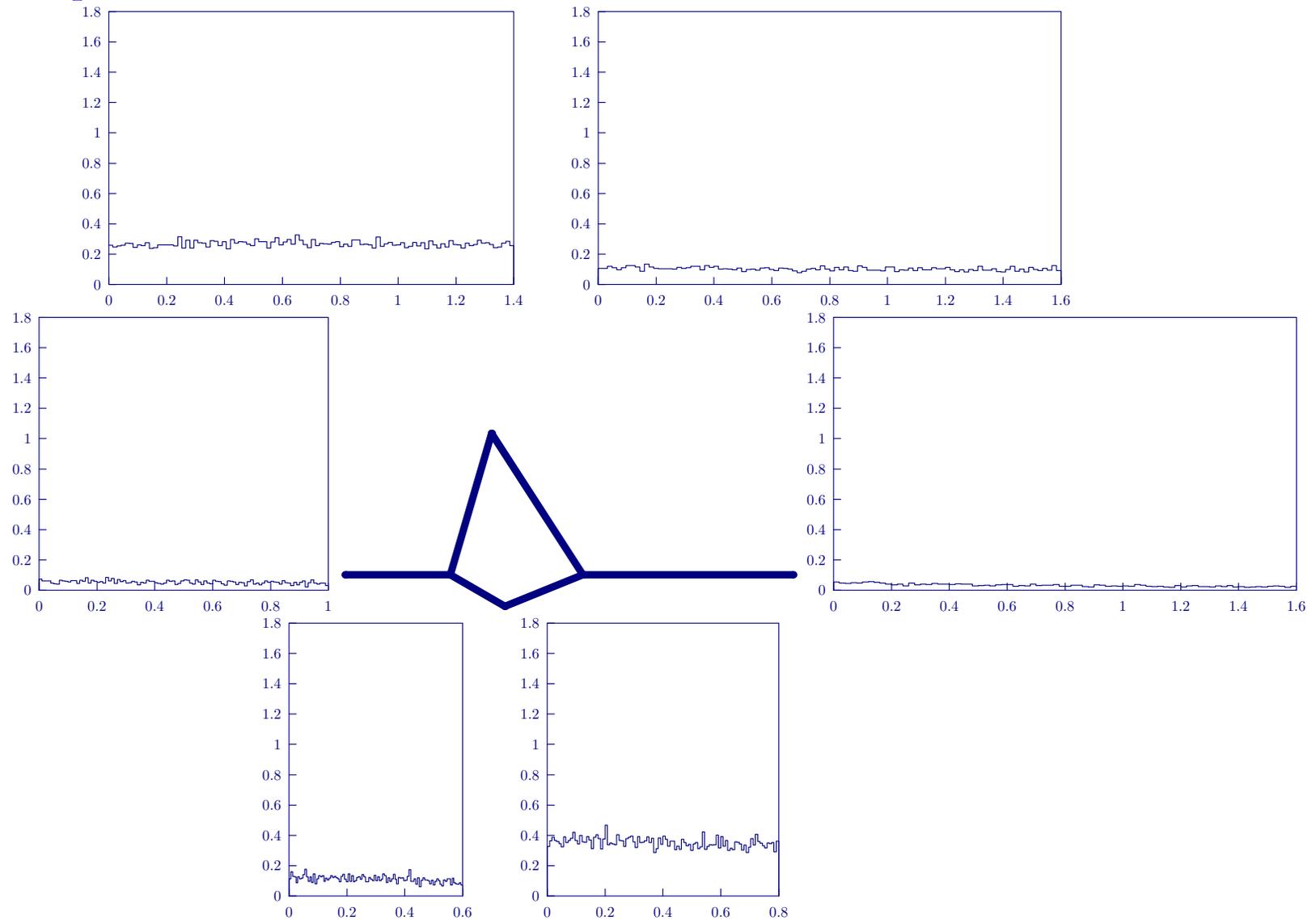
Temps=4,00



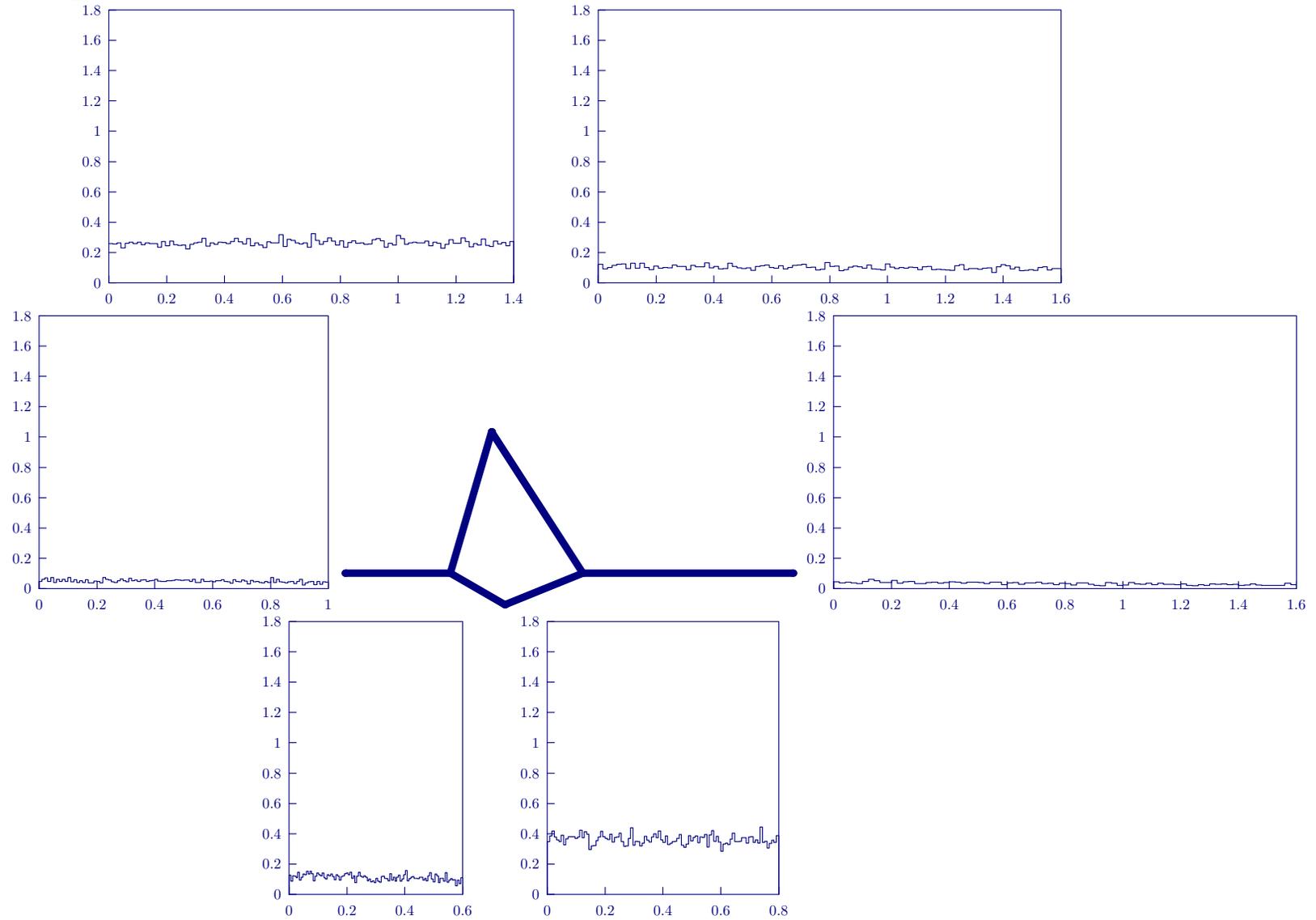
Temps=4,25



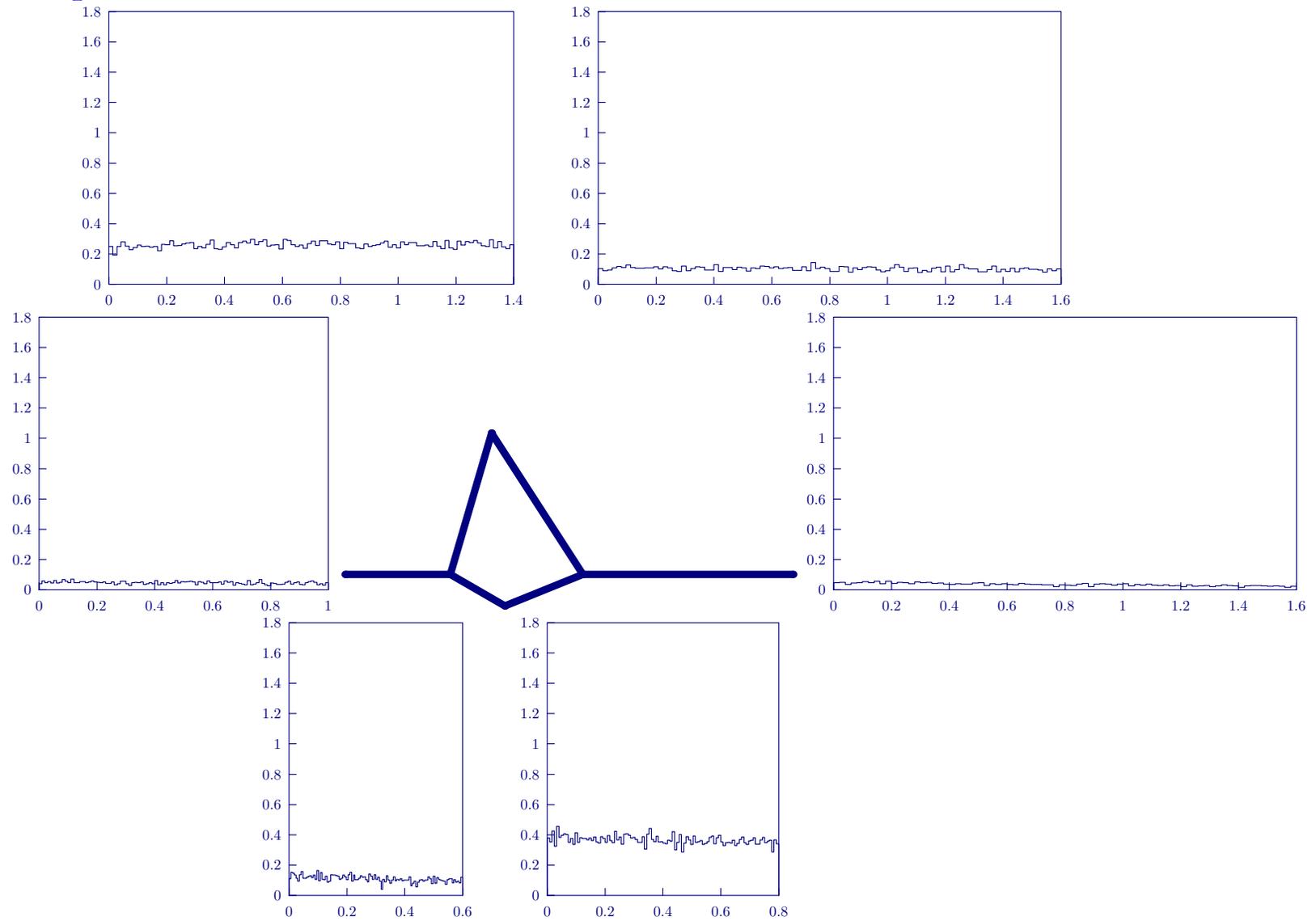
Temps=4,50



Temps=4,75



Temps=5,00



## Travaux en cours

Peu de travaux existent sur la simulation de processus de diffusions à coefficients discontinus

Nous avons mis en évidence l'intérêt du **mouvement brownien biaisé** pour modéliser des conditions de transmission

⇒ plusieurs méthodes de Monte Carlo possibles en dimension  $d = 1$

## Autres sujets de recherche

- Cas de la dimension  $d > 1$
- Application en géophysique (notamment modélisation des échanges de fluides entre le milieu poreux et les fissures)
- Applications dans d'autres domaines (MEG, ...)