

Simulation des processus en milieux discontinus

Antoine Lejay (IECL & Inria, Nancy)

D'après un travail commun avec L. Lenôtre et G. Pichot

Atelier de travail en stochastique et EDP, Bucarest, 14-15 sept. 2018

Milieux avec interfaces et diffusion

Les phénomènes de diffusion dans des milieux avec des interfaces sont ubiquitaires :

- roches de perméabilités différentes
- population d'insectes dans des habitats différents
- eau dans des cellule (DIRM, ...)
- plancton à proximité d'estuaires (eau salée/eau douce)
- super-nova
- dynamique moléculaire
- génétique
-

Pourquoi est-ce difficile numériquement ?

Une approche naturelle est de régulariser les coefficients le long de l'interface.

Cela induit des discontinuités numériques.

Pour mettre en place des méthodes de Monte Carlo, il est important de bien comprendre

- la dynamique des particules (stochastique)
- le modèle physique (répartition des masses) décrit au niveau macroscopique par une EDP

et donc les liens entre les modèles probabilistes et les modèles EDP.

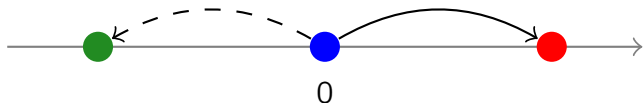
Un faux paradoxe

Heuristiquement, discontinuité \equiv **barrière perméable** : « La particule va d'un côté avec une certaine probabilité »

Mais où replacer la particule ?

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} \nabla (D \nabla \cdot)$$

Fait n° 1



$$\mathbb{P}_{\bullet}[\text{atteindre } \bullet \text{ avant } \bullet] = \frac{D_+}{D_+ + D_-}$$

Fait n° 2

$$\mathbb{P}_{\bullet}[\text{particule} \in \mathbb{R}_+ \text{ au temps } t] = \frac{\sqrt{D_+}}{\sqrt{D_+} + \sqrt{D_-}}$$

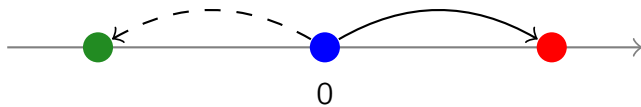
Un faux paradoxe

Heuristiquement, discontinuité \equiv **barrière perméable** : « La particule va d'un côté avec une certaine probabilité »

Mais où replacer la particule ?

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} \nabla (D \nabla \cdot)$$

Fait n° 1



$$\mathbb{P}_{\bullet}[\text{atteindre } \bullet \text{ avant } \bullet] = \frac{D_+}{D_+ + D_-}$$

Fait n° 2

$$\mathbb{P}_{\bullet}[\text{particule} \in \mathbb{R}_+ \text{ au temps } t] = \frac{\sqrt{D_+}}{\sqrt{D_+} + \sqrt{D_-}}$$



Les dynamiques spatiales et temporelles doivent être prises en compte pour définir un pas.

Les diffusions biaisées (dim. $d = 1$)

- $\sigma > 0$ bornée, à variation bornée
- b bornés, mesurable
- $\mu(dx) = \sum_i \kappa_i \delta_{x_i}(dx)$, $-1 \leq \kappa_i \leq 1$.

Une **diffusion biaisée** est la solution de l'EDS

$$dX_t = \sigma(X_t) dB_t + b(X_t) dt + \sum_i \kappa_i L_t^{x_i}(X),$$

- B mouvement brownien
- $L_t^a(X)$ **temps local** (symétrique) de X en a .

Une solution forte existe et est unique [Le Gall].

Cas particulier : le **Mouvement Brownien biaisé** (Skew Brownian motion, SBM [Itô & McKean, Harrison & Shepp, Walsh, ...])

$$dX_t = dB_t + \kappa L_t^0(X).$$

Le temps local

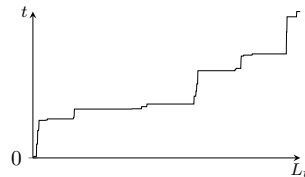
Le **temps local** d'un processus X « représente » le temps passé en 0 (le temps réel passé en 0 est nul) par la particule :

$$L_t(X) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\epsilon} \int_0^t \mathbb{1}_{X_s \in [-\epsilon, \epsilon]} d\langle X \rangle_s \quad (\diamond)$$

où $\langle X \rangle$ est le **crochet de X** . On a

- $L(X)$ continu, croissant,
- $L(X)$ constant presque partout,
- $L(X)$ ne croît que lorsque X est en 0.

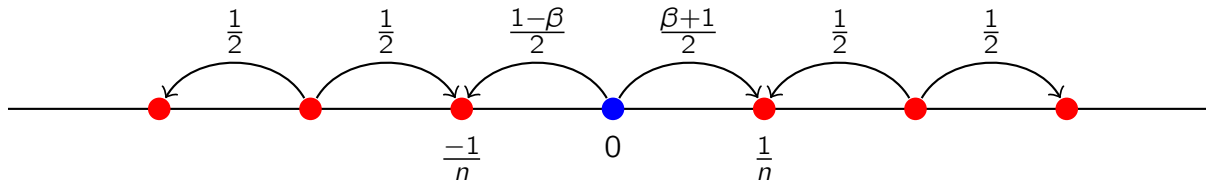
Ces propriétés viennent du caractère irrégulier du chemin des processus stochastiques.



Le mouvement brownien biaisé

$X_t = x + W_t + \beta L_t(X)$ est un **mouvement brownien biaisé** (SBM)
 $\beta \in (-1, 1)$.

SBM = limite d'une marche aléatoire **biasée**

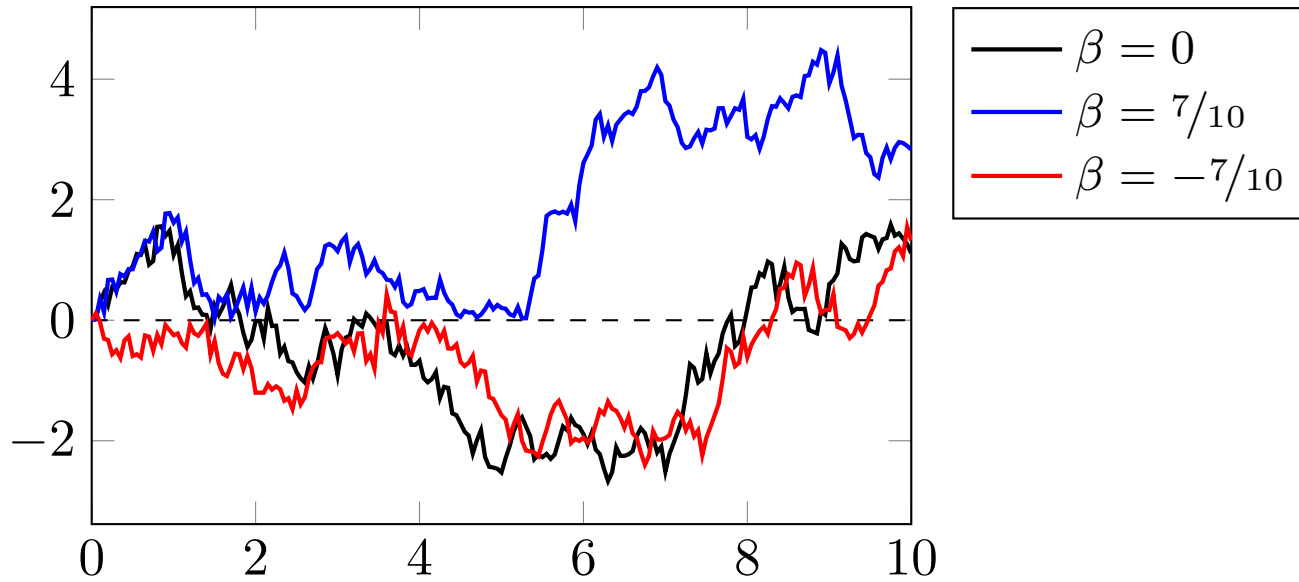


Le temps moyen pour atteindre l'un des deux points voisins est $1/\sqrt{n}$.

En dehors de 0, ce processus se comporte comme un mouvement brownien. Le temps local n'a d'effet qu'en 0.

Des schémas numériques peuvent être construits à partir du SBM.

Le mouvement brownien biaisé



Chemins du SBM

Générateur infinitésimal d'une diffusion biaisée

Le générateur infinitésimal d'une diffusion biaisée est de la forme

$$\mathcal{L} = \frac{\rho}{2} \nabla(a \nabla \cdot) + b \nabla$$

où

- ρ et α sont \mathcal{C}^1 par morceaux avec des discontinuités aux points x_i .
- b est mesurable et bornée

L'EDS associée est

$$dX_t = \sqrt{\rho a}(X_t) dB_t + b(X_t) dt + \sum_i \kappa_i dL_t^{x_i}(X)$$

$$\kappa_i = \frac{\sqrt{a(x_i+) \rho(x_i+)} - \sqrt{a(x_i-) \rho(x_i-)}}{\sqrt{a(x_i+) \rho(x_i+)} + \sqrt{a(x_i-) \rho(x_i-)}}$$

Le domaine du générateur

Les fonctions du **domaine** de \mathcal{L} vérifie aux points de discontinuités

$$a(x_i+) \nabla f(x_i+) = a(x_i-) \nabla f(x_i-) \text{ et } f(x_i-) = f(x_i+).$$

a et ρ peuvent être discontinues au même endroit.

En appliquant la formule d'**Itô-Tanaka** avec $\Phi(x) = \int^x 1 \sqrt{\rho(y)a(y)} dy$.

Lorsque a, ρ sont constants sur \mathbb{R}_+ et \mathbb{R}_- ,

$Y = \Phi(X)$ est sol. de $dY_t = B_t + \beta L_t^0(X)$

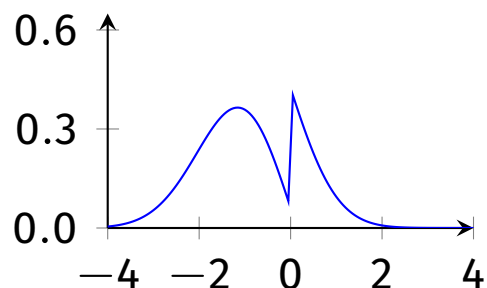
$$\beta = \frac{\sqrt{\frac{a(0+)}{\rho(0+)}} - \sqrt{\frac{a(0-)}{\rho(0-)}}}{\sqrt{\frac{a(0+)}{\rho(0+)}} + \sqrt{\frac{a(0-)}{\rho(0-)}}}.$$

Le paradoxe n'en n'est pas un...

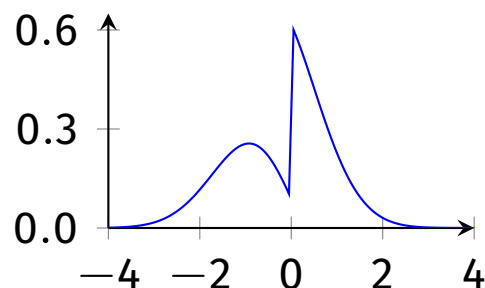
Densité et formule de Green

Principes de réflexion + $\mathbb{P}[\text{excursion} \geq 0] = (1 + \beta)/2$

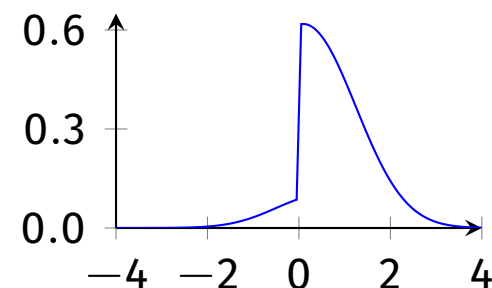
$$p_\beta(t, x, y) = \gamma(t, x - y) + \text{sgn}(y)\beta\gamma(t, |x| + |y|).$$



$$x = -1$$



$$x = -1/2$$



$$x = 1/2$$

$$\beta = 1/2, t = 1$$

- Pour la densité d'une diffusion biaisée avec $b = 0$, on se ramène au SBM par Itô-Tanaka (changement spatial).
- Dans le cas de plusieurs discontinuités, on peut « localiser » en utilisant un pas de temps assez petit.

Schéma à pas constant pour le SBM

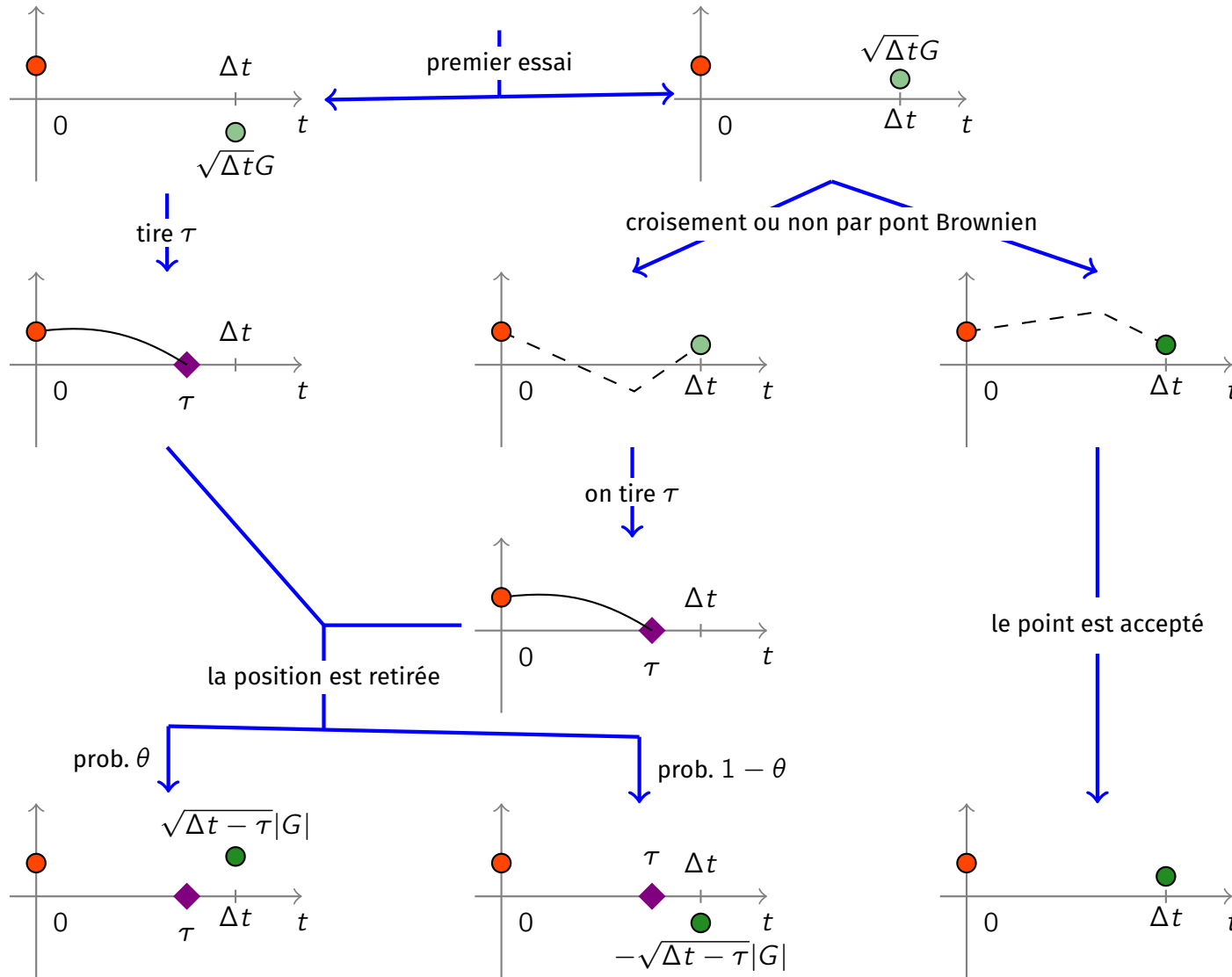


Schéma à pas exponentiel

Avec un terme de dérive, la densité $p(t, x, y)$ s'exprime difficilement.

La **fonction de Green** $g(\lambda, x, y)$ résout

$$(\lambda - \mathcal{L})g(\lambda, x, y) = \delta_x(y).$$

C'est la transformée de Laplace de la densité :

$$g(\lambda, x, y) = \int_0^{+\infty} \exp(-\lambda t) p(t, x, y) dt.$$

Ainsi,

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda g(\lambda, x, y) dy = 1 \text{ et } \gamma(\lambda, x, y) > 0.$$

Nous utilisons $y \mapsto \lambda g(\lambda, x, y)$ comme densité de la variable aléatoire X_ξ avec $\xi \sim \mathcal{E}(\lambda)$.

Schéma à pas exponentiel II

- Pour un pas de temps $\Delta t = T/n$, on pose $\lambda = \Delta t^{-1}$.
- On simule récursivement

$$\bar{X}_{k+1} \sim \lambda g(\lambda, \bar{X}_k, \cdot).$$

- On retourne

$$\begin{aligned} & ((0, \bar{X}_0), (\Delta t, \bar{X}_1), \dots, (n\Delta t, \bar{X}_{n\Delta t})) \\ & \approx ((0, X_0), (\Delta t, X_1), \dots, (n\Delta t, X_{n\Delta t})). \end{aligned}$$

Ici, $\bar{X}_k = X_{\zeta_k}$ à des temps **inconnus** ζ_k d'un Poisson.

Si Δt est petit, alors ζ_k est proche de $k\Delta t$ et donc $\bar{X}_k \approx X_{k\Delta t}$.

Cet algorithme s'applique dès que l'on connaît $g(\lambda, x, y)$.

Dans le cas du Brownien [Jansons & Lythe],

$$\gamma(\lambda, x, y) \propto \exp(-\sqrt{2\lambda}|y - x|)$$

et donc $\bar{X}_{k+1} = \bar{X}_k + \sigma_k \xi_k$ avec $\xi_k = \mathcal{E}(\sqrt{2\lambda})$ et $\mathbb{P}[\sigma_k = 1] = \mathbb{P}[\sigma_k = -1] = 1/2$.

Calcul de la fonction de Green

$$\mathcal{L} = \frac{\rho}{2} \nabla(a \nabla \cdot) + b \nabla \cdot \text{ avec } a, b, \rho \text{ constants sur } \mathbb{R}_+ \text{ et } \mathbb{R}_-.$$

$$(\lambda - \mathcal{L})g(\lambda, x, y) = \delta_x(y), \quad y \in \mathbb{R}.$$

Avec Itô-Tanaka, on peut supposer que $a = \rho = 1$ en changeant la **condition de flux en 0** et $b = \gamma_+ \mathbb{1}_{x>0} + \gamma_- \mathbb{1}_{x<0}$.

Sauf en 0 et x , $g(\lambda, x, y)$ est combinaison linéaire de

$$\psi_{\pm}(y) = \exp\left(\left(-\gamma_{\pm} + \sqrt{\gamma_{\pm}^2 + 2\lambda y}\right)\right),$$

$$\phi_{\pm}(y) = \exp\left(\left(-\gamma_{\pm} - \sqrt{\gamma_{\pm}^2 + 2\lambda y}\right)\right).$$

$$(1 + \beta) \nabla g(\lambda, x, 0+) = (1 - \beta) \nabla g(\lambda, x, 0-)$$

0
 X

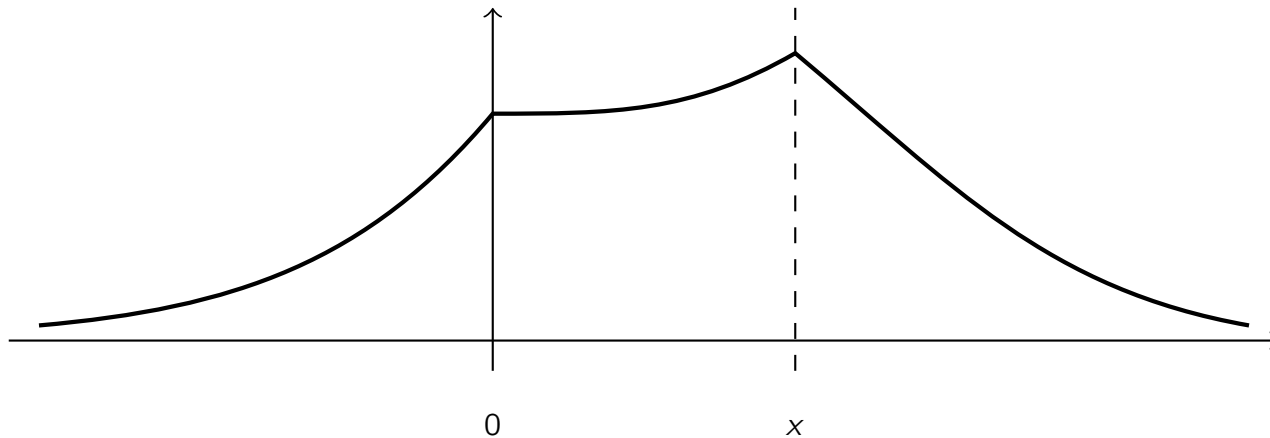
$\nabla g(\lambda, x, 0+) - \nabla g(\lambda, x, 0-) = 2$

Calcul de la fonction de Green

Avec les conditions au bord, si $x > 0$,

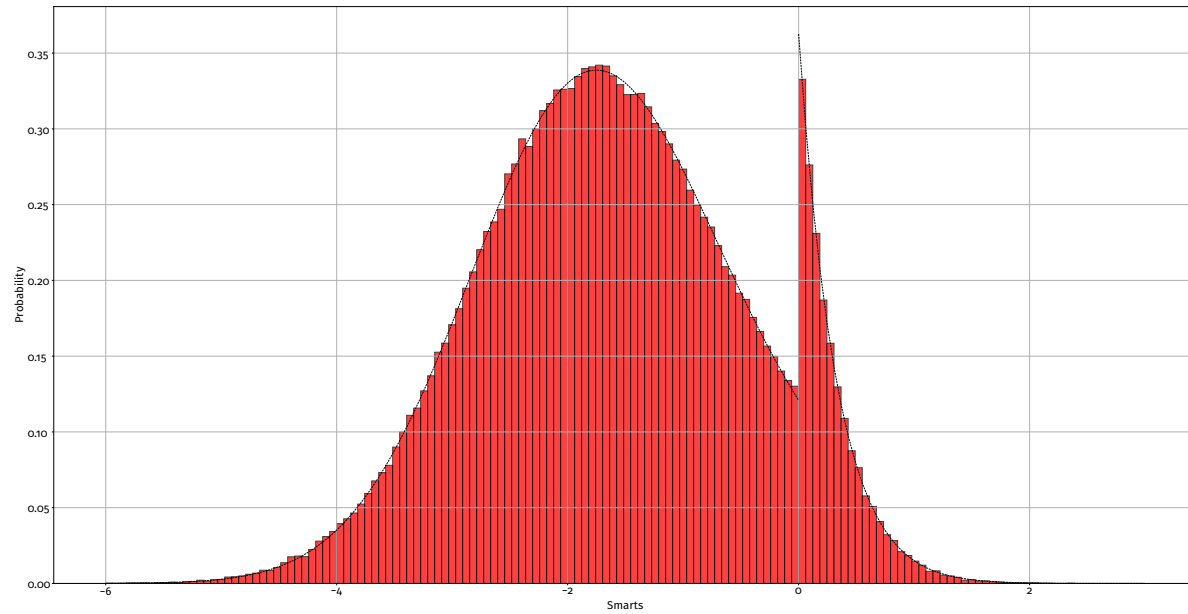
$$g(\lambda, x, y) = \begin{cases} c_1 \psi_-(y) \phi_+(x) & \text{if } y < 0, \\ c_2 \phi_+(x) \phi_+(y) + c_3 \phi_+(y) \psi_+(x) & \text{if } 0 < y < x, \\ c_2 \phi_+(x) \phi_+(y) + c_3 \phi_+(x) \psi_+(y) & \text{if } x < y. \end{cases}$$

Les coefficients c_1 , c_2 et c_3 s'obtiennent par résolution d'un système linéaire.



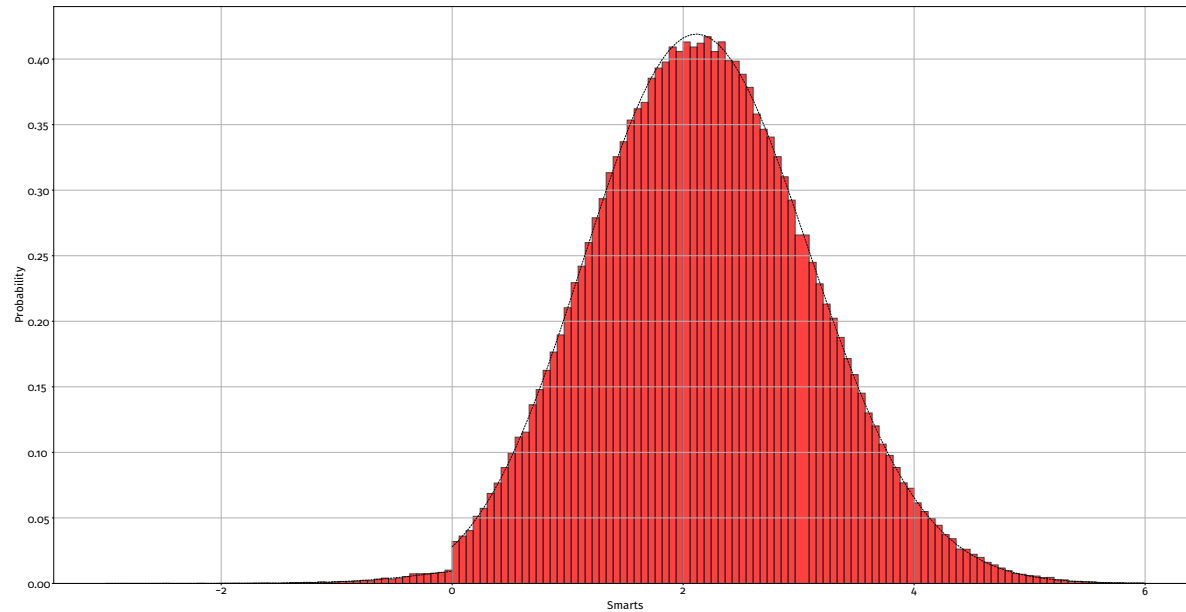
Une variable aléatoire de loi $\lambda g(\lambda, x, \cdot)$ est facile à simuler.

Exemples numériques



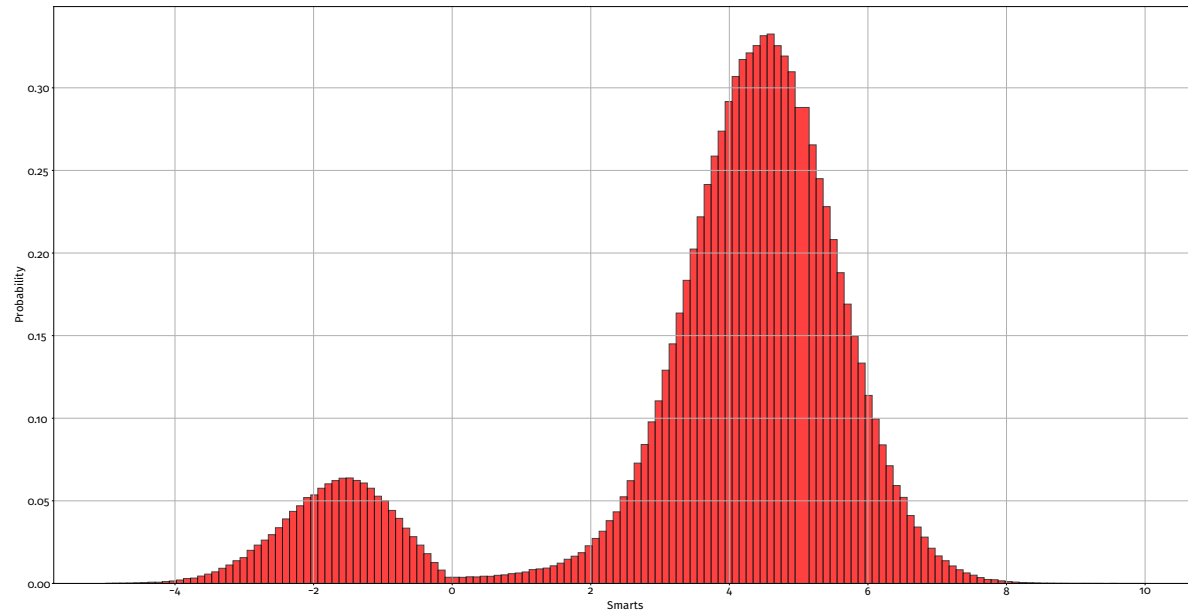
$$\beta = 0.5, x = 0, T = 1, \Delta t = 1/500, \gamma_+ = \gamma_- = -2$$

Exemples numériques



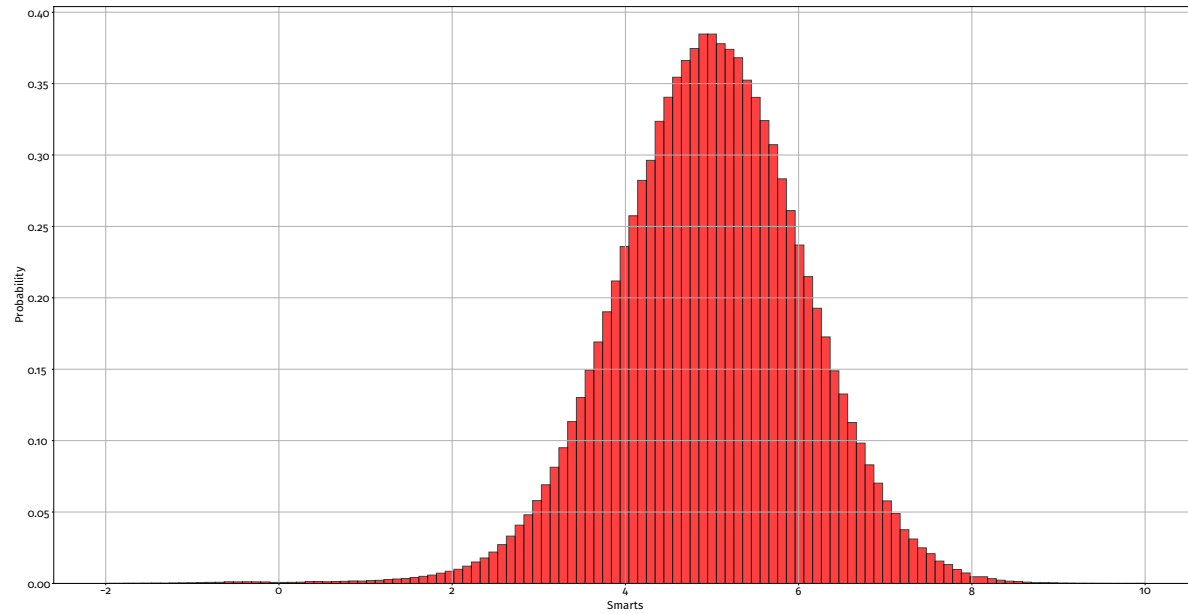
$$\beta = 0.5, x = 0, T = 1, \Delta t = 1/500, \gamma_+ = \gamma_- = 2$$

Exemples numériques



$$\beta = 0.25, x = 0, T = 1, \Delta t = 1/500, \gamma_+ = 4.5, \gamma_- = -1$$

Exemples numériques



$$\theta = 0.35, x = 0, T = 1, \Delta t = 1/500, \gamma_+ = 5, \gamma_- = 2$$

Conclusion

- Le cas 1d est assez bien compris.
- Ces approches peuvent se combiner avec des milieux avec plusieurs discontinuités, conditions au bord, ...
- Nous avons besoin de calcul stochastique **et** d'analyse des EDP.
- Des algorithmes peuvent être développés dans certains cas $d > 1$ mais cela reste largement ouvert.

Références

- A. Lejay & G. Pichot, *Simulating diffusion processes in discontinuous media : A numerical scheme with constant time steps*, J. Comput. Phys. 2012.
- A. Lejay, L. Lenôtre & G. Pichot, *An exponential timestepping algorithm for diffusion with discontinuous coefficients*, 2018.
- K. M. Jansons & G.D. Lythe, *Efficient numerical solution of stochastic differential equations using exponential timestepping*, J. Statist. Phys., 2000.
- J.-F. Le Gall, *One-dimensional stochastic differential equations involving the local times of the unknown process*, In : *Stochastic Analysis*, LNM 1095, 1985.
- J.M. Harrison & L.A. Shepp, *On Skew Brownian motion*, Ann. Probab., 1981.
- K. Itô & H.P. McKean, *Diffusion processes and their sample paths*, Springer-Verlag, 1974.
- J.B. Walsh, *A diffusion with discontinuous local time*, In : *Temps locaux*, Astérisque 52-53, 1978.
- ... et quantité d'autres articles.