

Une méthode de Monte Carlo pour simuler des particules dans un réseau de fissures

Antoine Lejay

INRIA Lorraine/Institut Élie Cartan

Homogénéisation numérique en milieux poreux

12 décembre 2003 — Université de Pau

- Objectifs**
- ① calculer la position où le temps d'atteinte d'une certaine zone pour des particules diffusant dans un réseau de fissures
 - ② gérer le passage des particules de fluides entre les fissures et le milieu poreux

Pourquoi du Monte Carlo ?

- pour suivre l'évolution des particules, une connaissance **locale** du milieu suffit
- pas d'inversion de matrices
- codes numériques courts et faciles à paralléliser
- **problème** : lenteur de la vitesse de convergence

- Approche**
- utilisation de processus stochastiques continus en temps et en espace (méthode sans grille)
 - description probabiliste exacte des **conditions de transmission**

$$\nabla u(t, 0+) = C \nabla u(t, 0-)$$

où $u(t, x)$ est la solution d'une EDP parabolique $\partial_t u(t, x) = Lu(t, x)$ (loi de Darcy par exemple)

Représentation probabiliste des solutions d'EDP

$$\begin{cases} \frac{\partial p(t, x, y)}{\partial t} = Lp(t, x, y), & L = \partial_{x_i}(a_{i,j}\partial_{x_j}\cdot) + b_i\partial_{x_i} \text{ ou } L = a_{i,j}\partial_{x_i x_j} + b_i\partial_{x_i} \\ p(t, x, y) \xrightarrow{t \rightarrow 0} \delta_y(x) \end{cases}$$

Il existe des trajectoires continues aléatoires X (=processus stochastique) telles que $p(t, x, y) dy = \mathbb{P}[X_t \in dy | X_0 = x]$.

$$\begin{aligned} u(t, x) &:= \mathbb{E}_x[f(X_t)] = \int_{\mathbb{R}} p(t, x, y)f(y) dy \\ &\rightarrow u \text{ sol. de } \partial_t u = Lu \text{ avec } u(0, \cdot) = f \end{aligned}$$

Des représentations probabilistes existent aussi pour les EDP avec conditions au bord de Dirichlet, Neumann, pour les EDP elliptiques, certains problèmes non-linéaires, ...

méthode de Monte Carlo : idée générale

$$\mathbb{E}[f(X)] \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X^{(i)}), \quad X^{(i)} \text{ réalisations indép. d'une même v.a.}$$

Que se passe-t'il aux discontinuités ?

$$L = \frac{1}{2} \nabla(a \nabla \cdot) \text{ avec } a = \begin{cases} a_+ \text{ sur } \mathbb{R}_+ \\ a_- \text{ sur } \mathbb{R}_- \end{cases} \rightsquigarrow X \text{ processus de diffusion}$$

$$\text{Si } \Phi(x) = \begin{cases} x/\sqrt{a_+} \text{ sur } \mathbb{R}_+ \\ x/\sqrt{a_-} \text{ sur } \mathbb{R}_- \end{cases} \text{ alors } Y_t = \Phi(X_t) \text{ solution de } Y_t = B_t + \alpha L_t^0(Y),$$

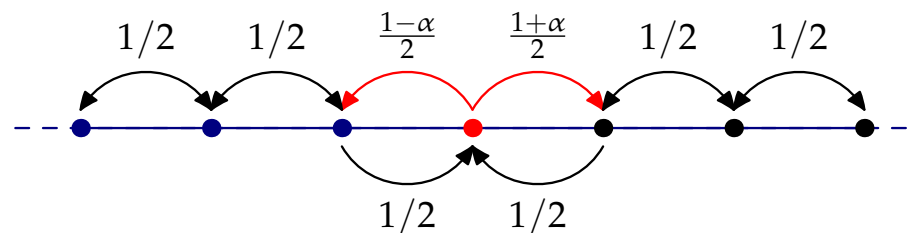
- B_t mouvement brownien

$$\bullet \alpha = \frac{\sqrt{a_+} - \sqrt{a_-}}{\sqrt{a_+} + \sqrt{a_-}}$$

- $L_t^0(Y)$ *temps local* de Y en 0 (ne croît que sur un ensemble de mesure de Lebesgue nulle!)

$\rightsquigarrow Y$ est appelé le *mouvement brownien biaisé de paramètre α*

Y est la limite d'une marche aléatoire



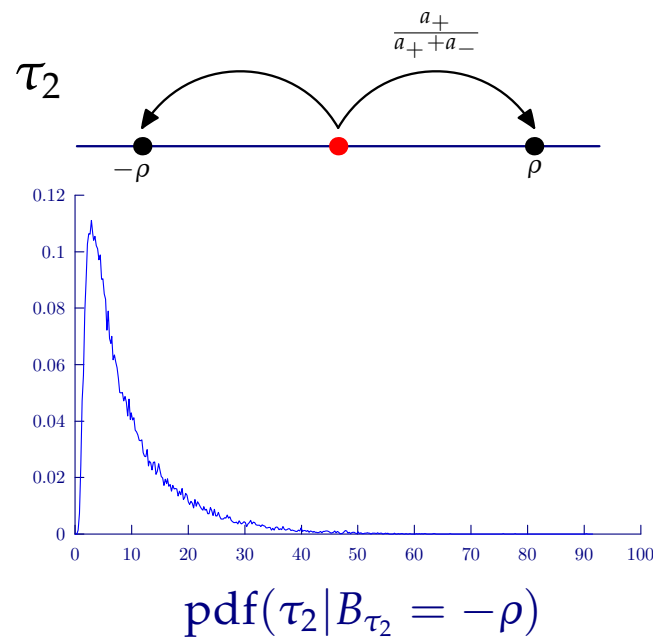
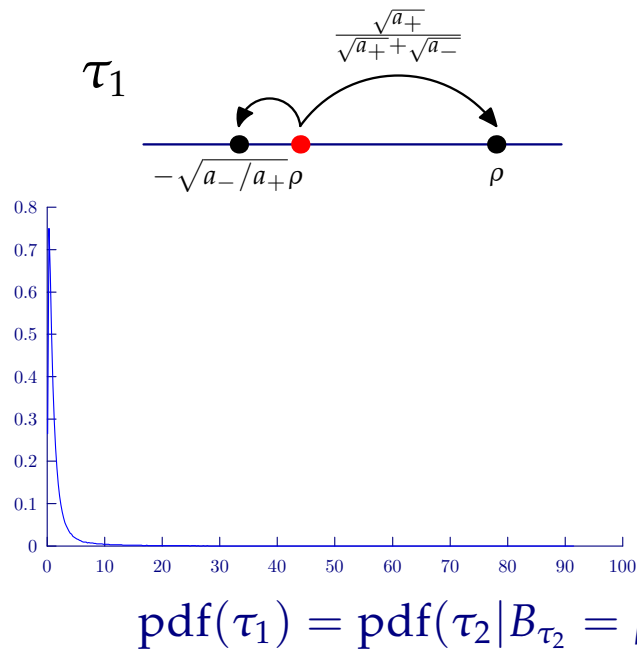
Les discontinuités sont perçues comme des barrières perméable

Il y a des difficultés inhérentes à l'utilisation de processus continus en temps et en espace qui sont dues à l'irrégularité des trajectoires

Il faut bien prendre en compte les différences de vitesse de chaque côté de la discontinuité (si $a_+ \gg a_-$)

Mais on a une représentation probabiliste exacte des conditions de transmission et la possibilité de faire des simulations

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



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 : $\sum_{e \sim v} \alpha_{v,e} \nabla_{v,e} C(t, v) = 0$

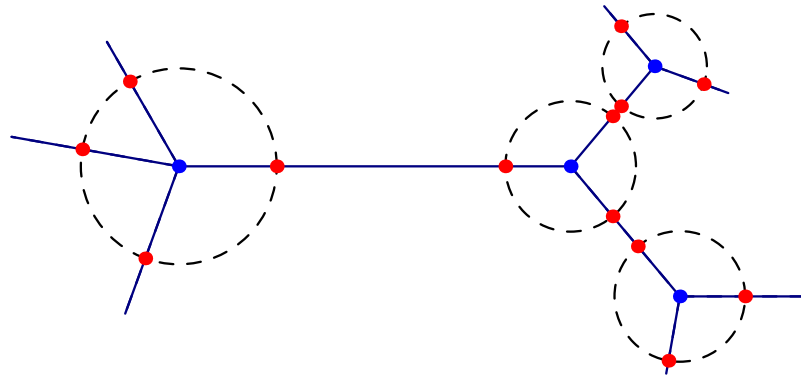
Algorithme (cas imperméable)

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



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

avec le temps proprement incrémenté

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

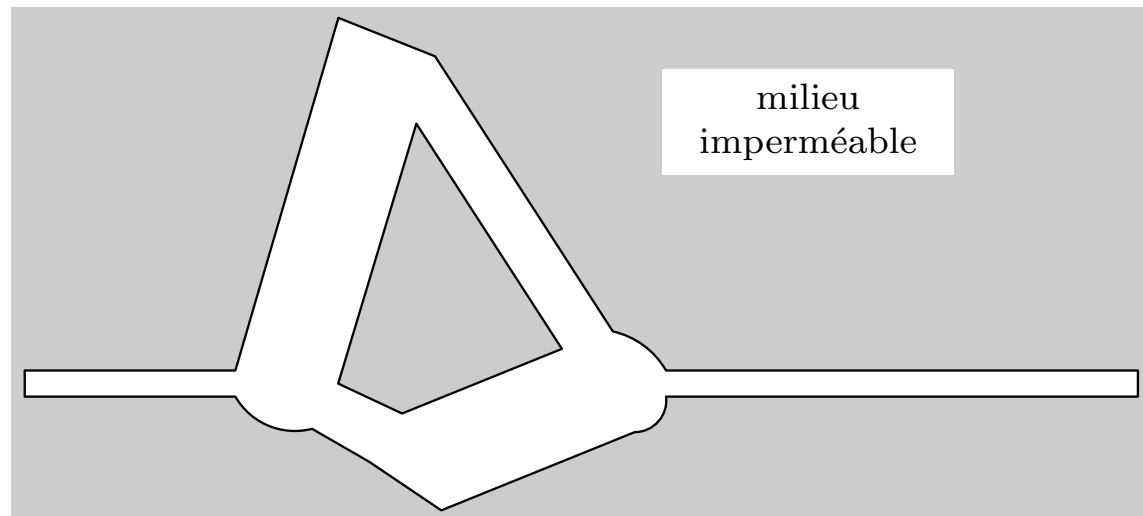
Exemple numérique : calcul de la concentration en un point

Concentration d'un traceur dans un réseau de fissures

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

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

\equiv résolution de l'éq. adjointe de (*)



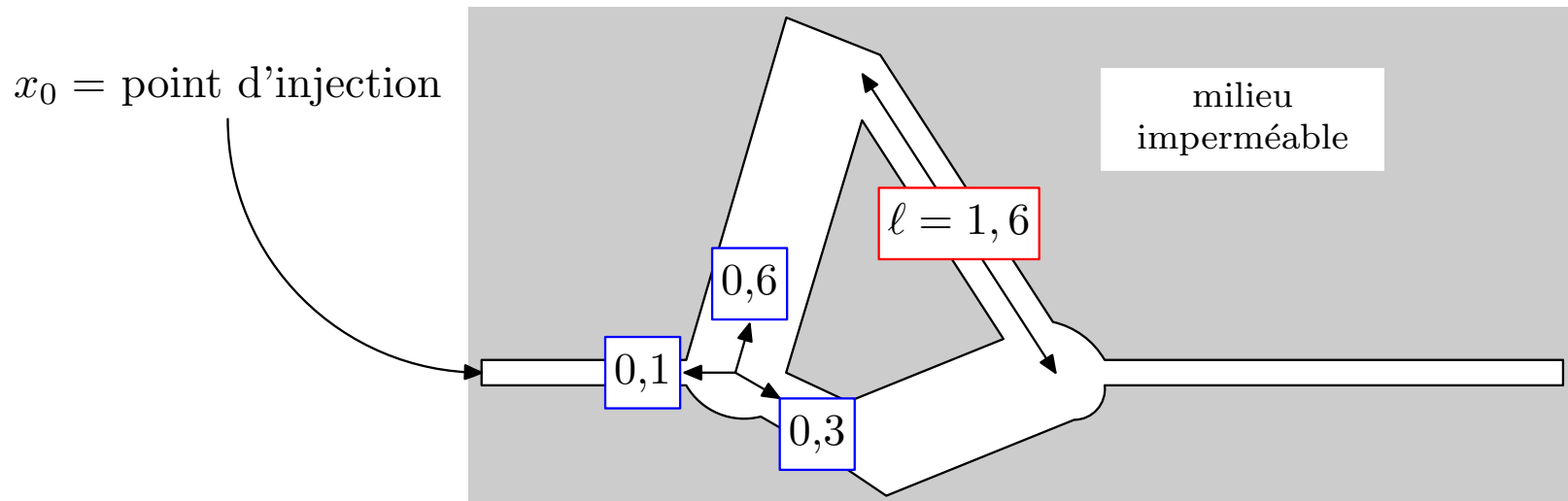
Exemple numérique : calcul de la concentration en un point

Concentration d'un traceur dans un réseau de fissures

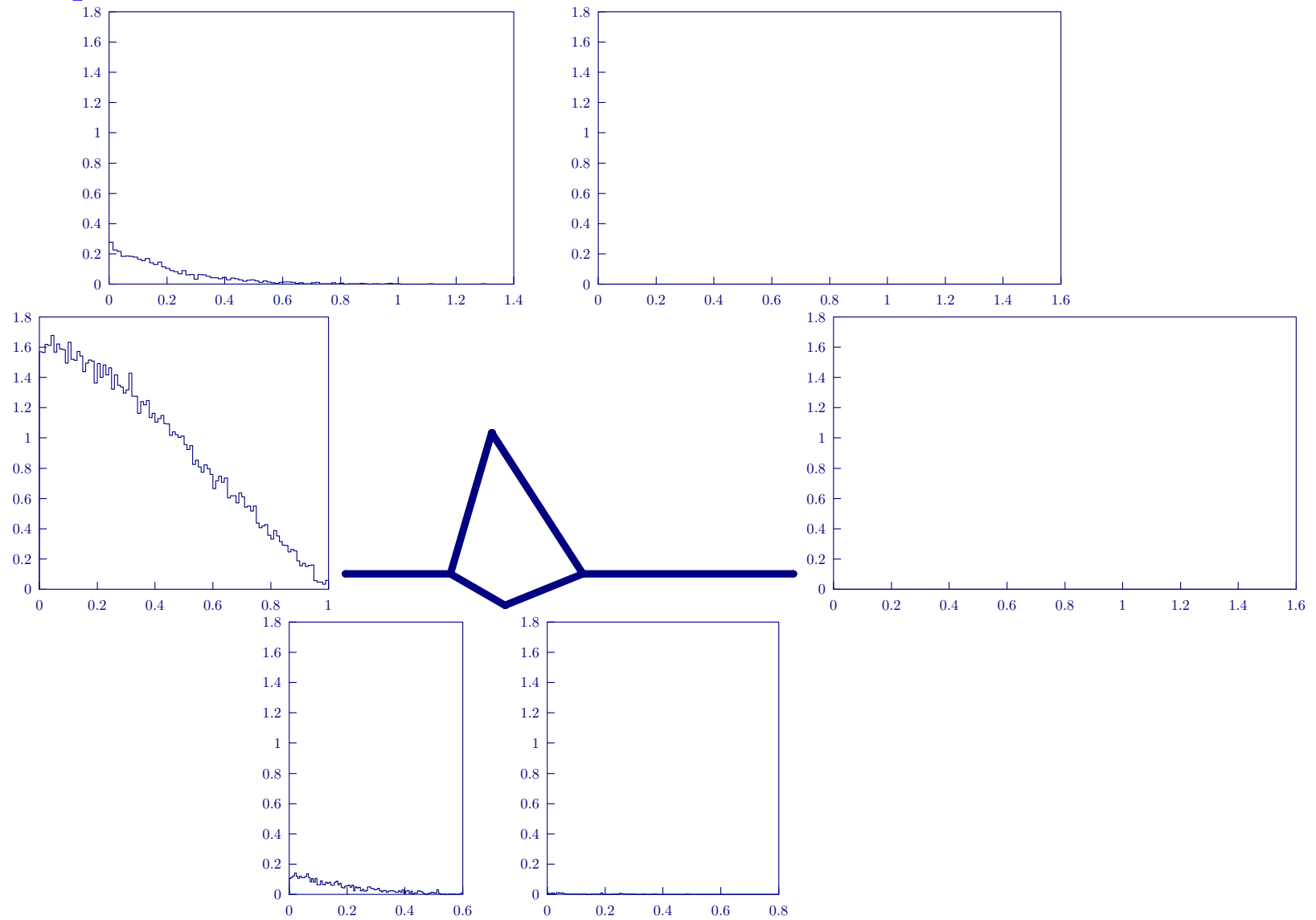
$$\frac{\partial C(t, x)}{\partial t} = \Delta C(t, x) + \text{condition de flux aux noeuds} \quad (\star)$$
$$\implies C(t, x) = \int_{\text{graphe}} p(t, x, y) f(y) dy \quad \text{si } C(0, x) = f(x)$$

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

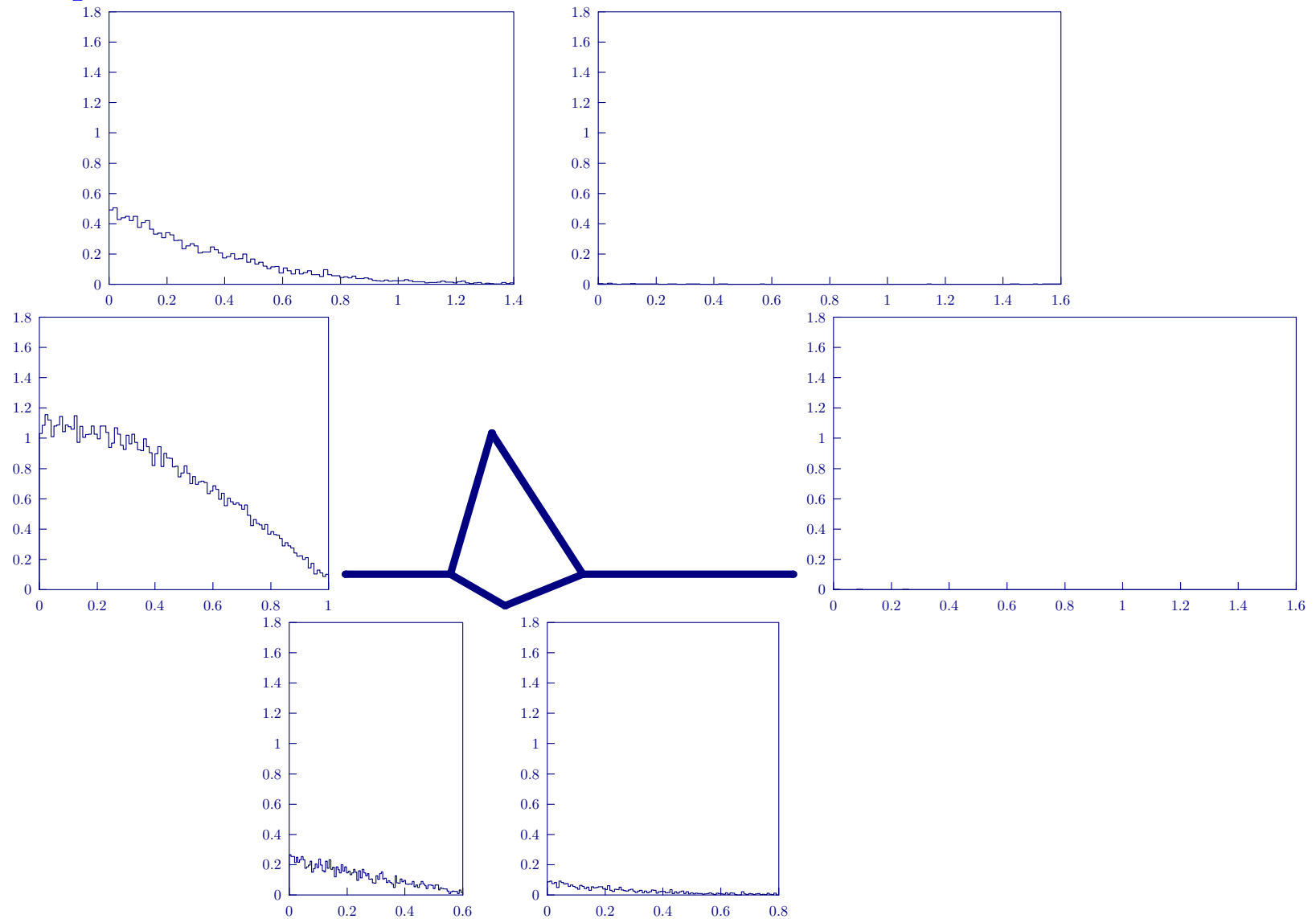
\equiv résolution de l'éq. adjointe de (\star)



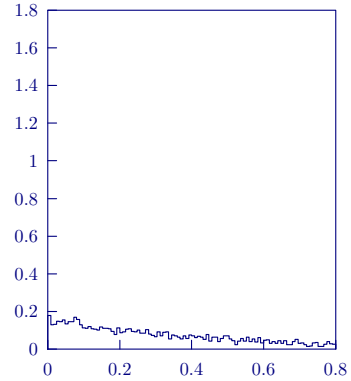
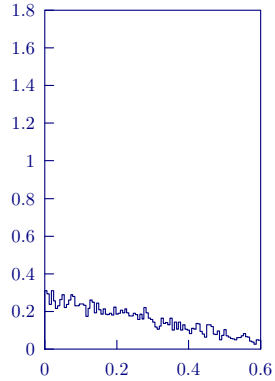
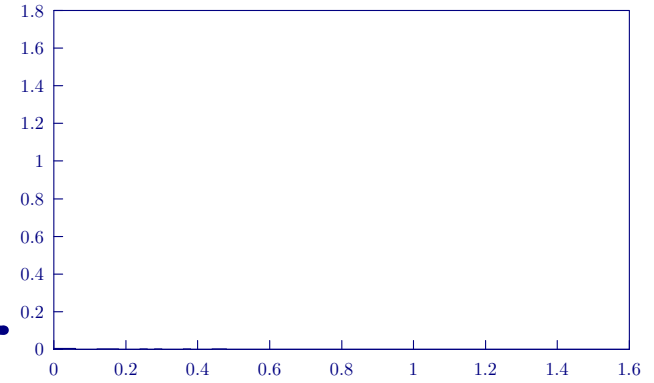
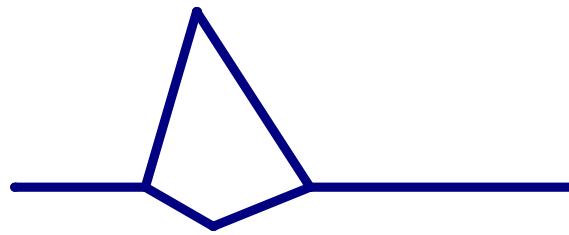
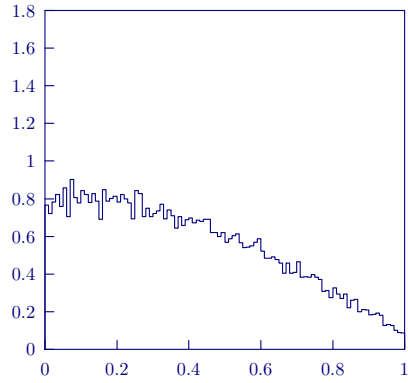
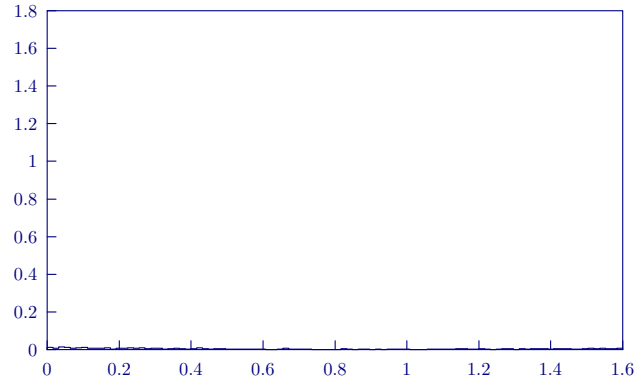
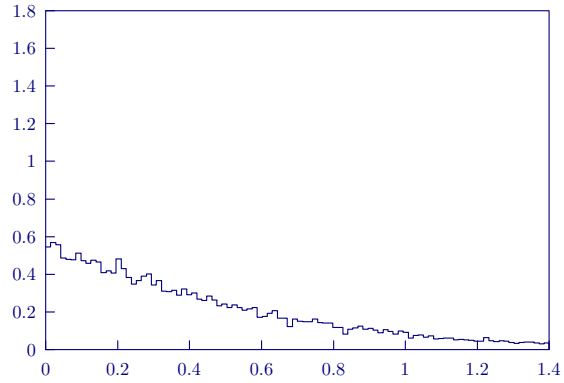
Temps=0,25



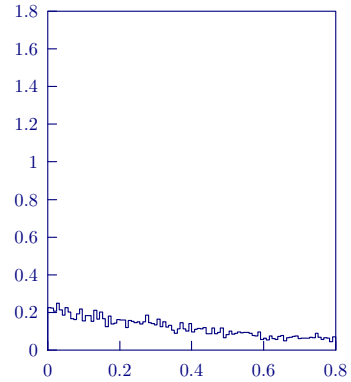
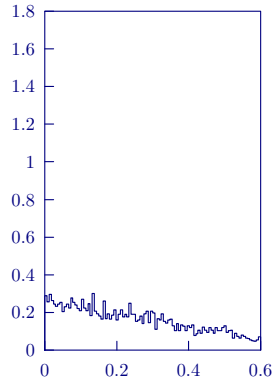
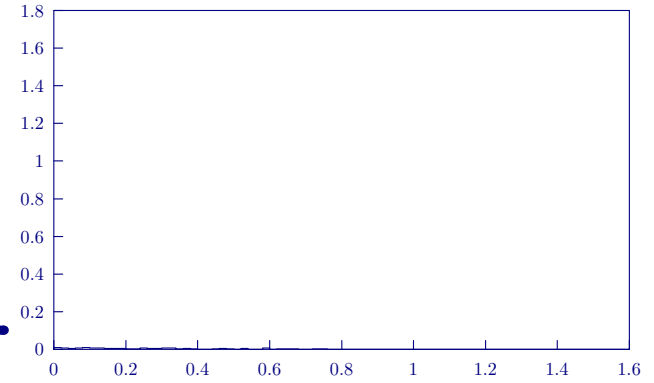
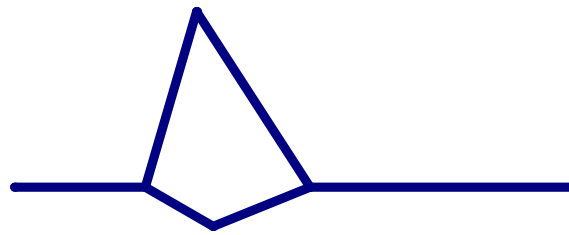
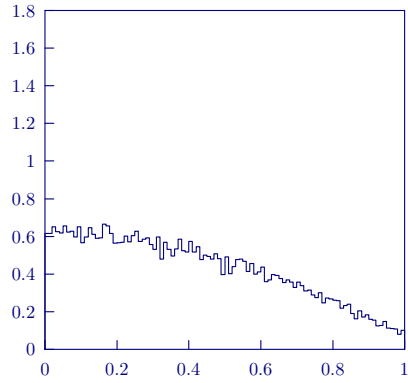
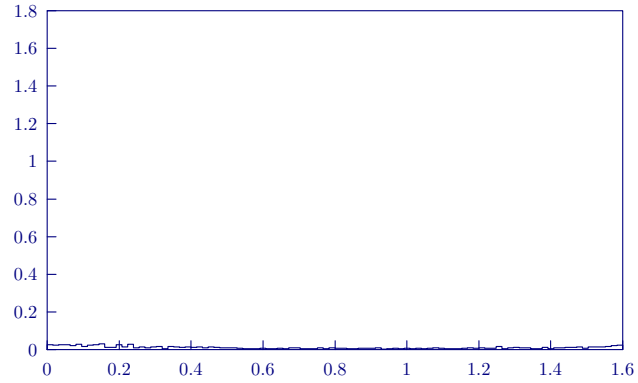
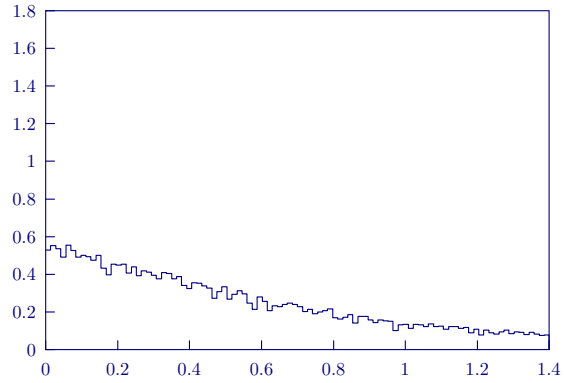
Temps=0,50



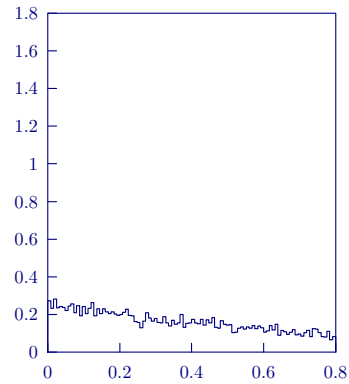
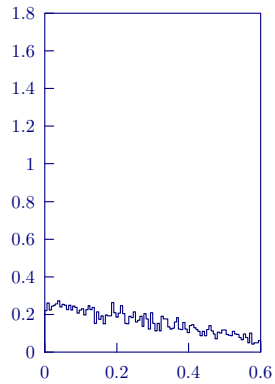
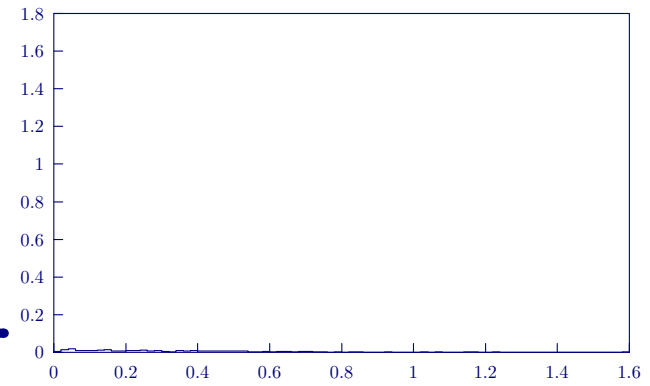
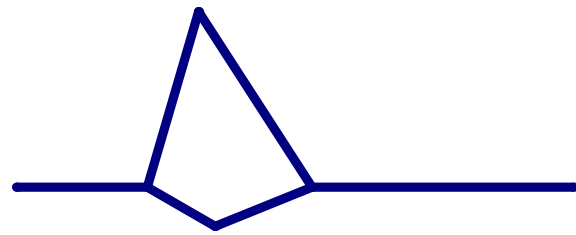
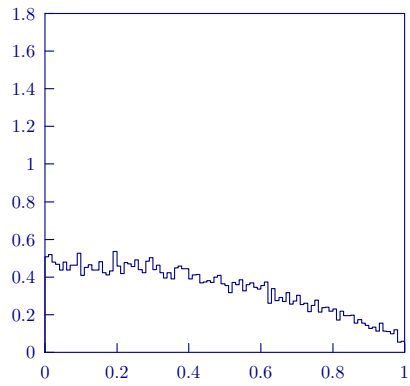
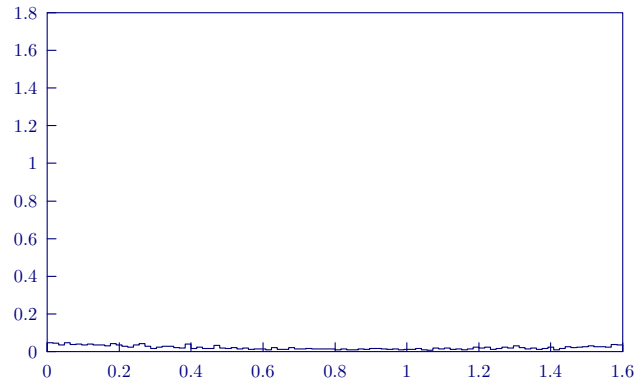
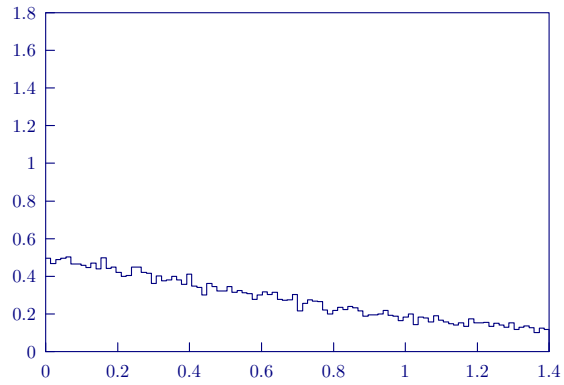
Temps=0,75



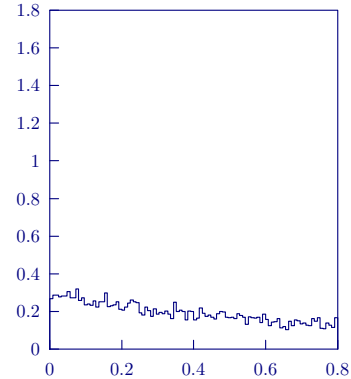
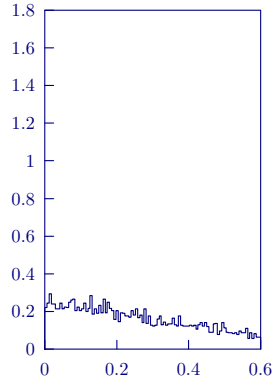
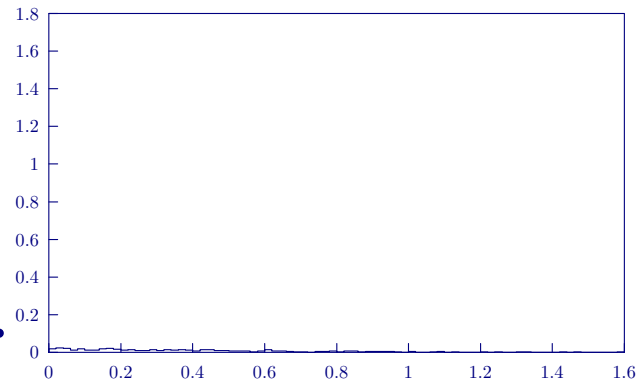
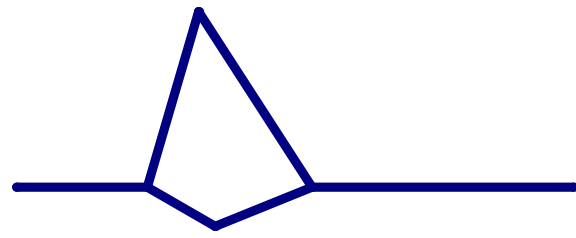
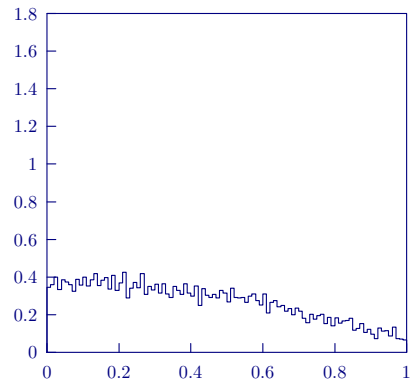
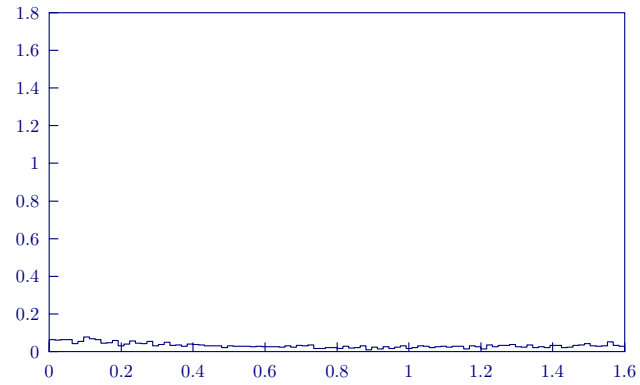
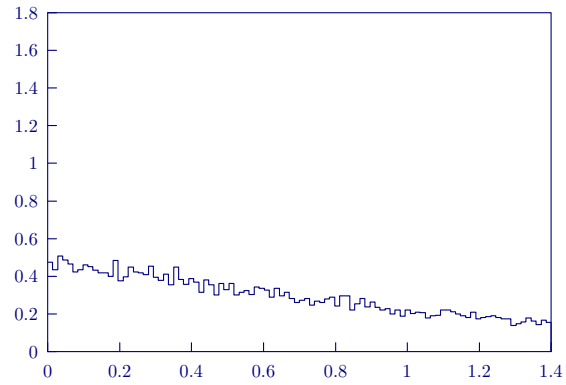
Temps=1,00



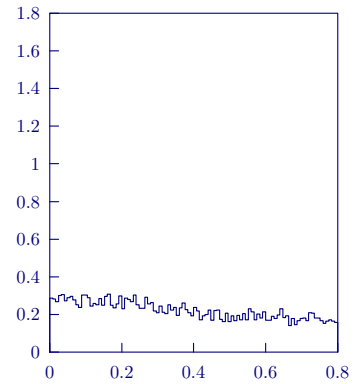
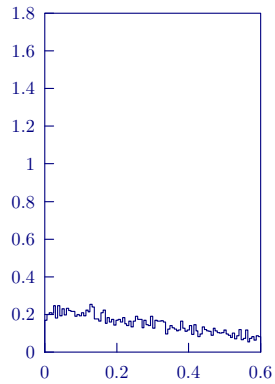
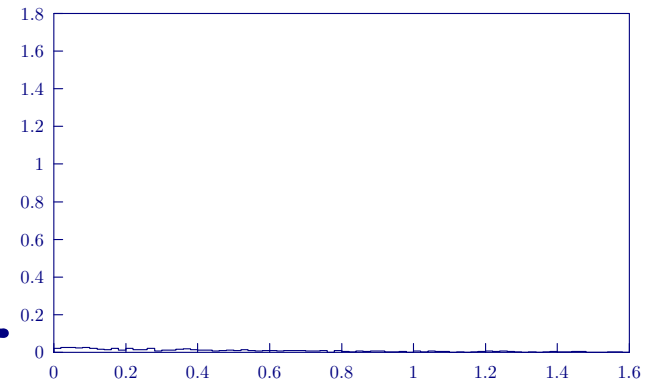
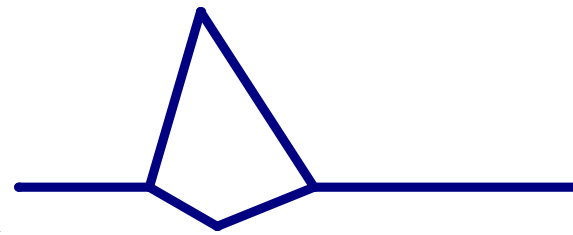
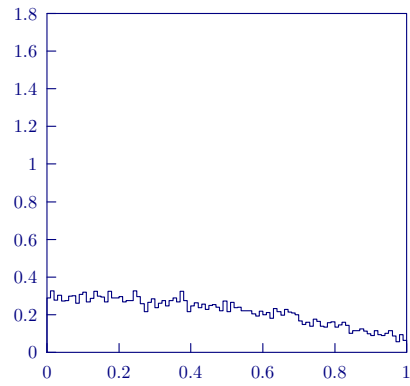
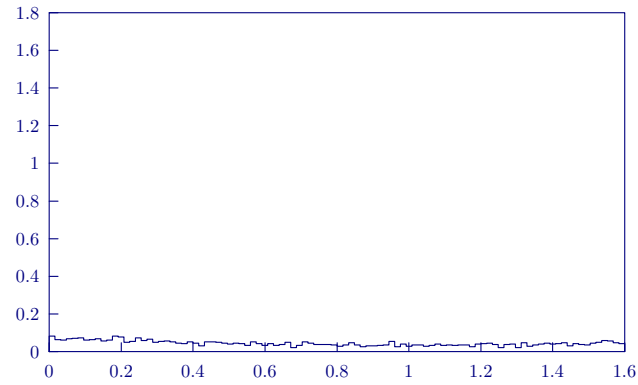
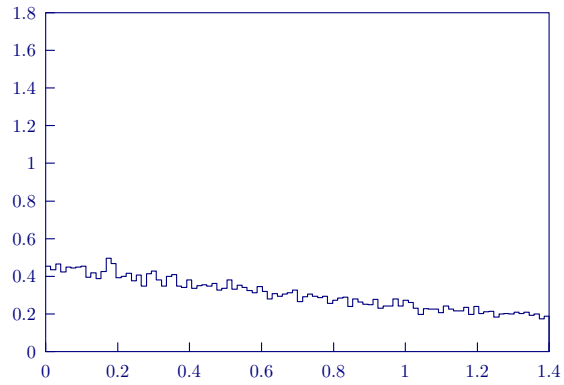
Temps=1,25



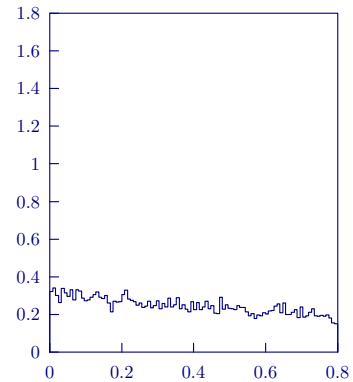
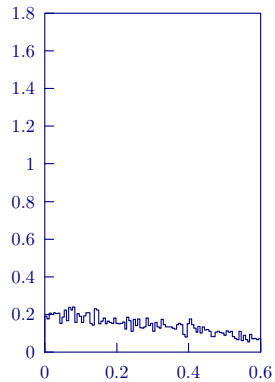
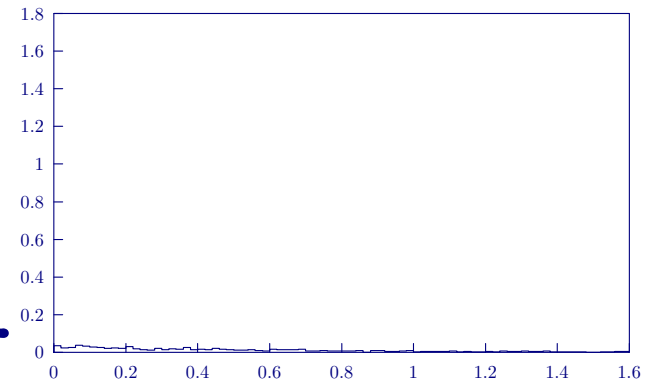
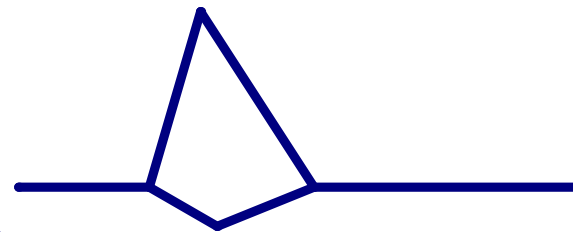
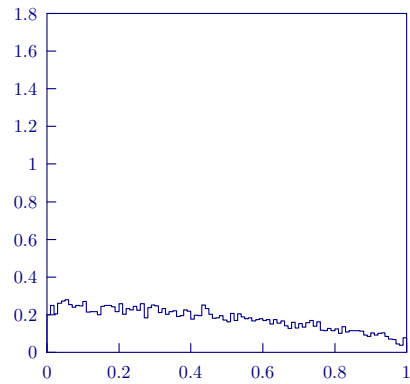
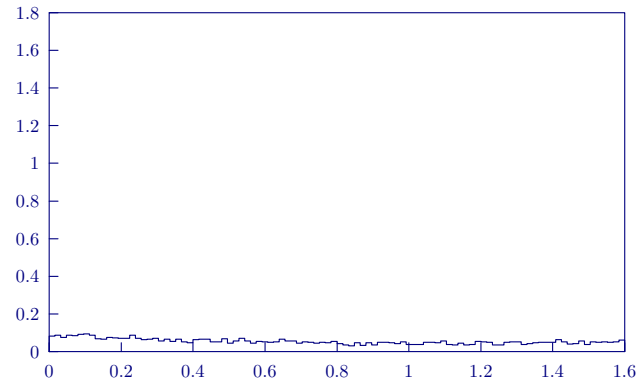
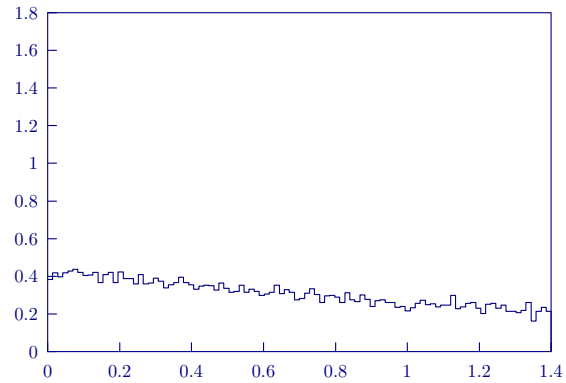
Temps=1,50



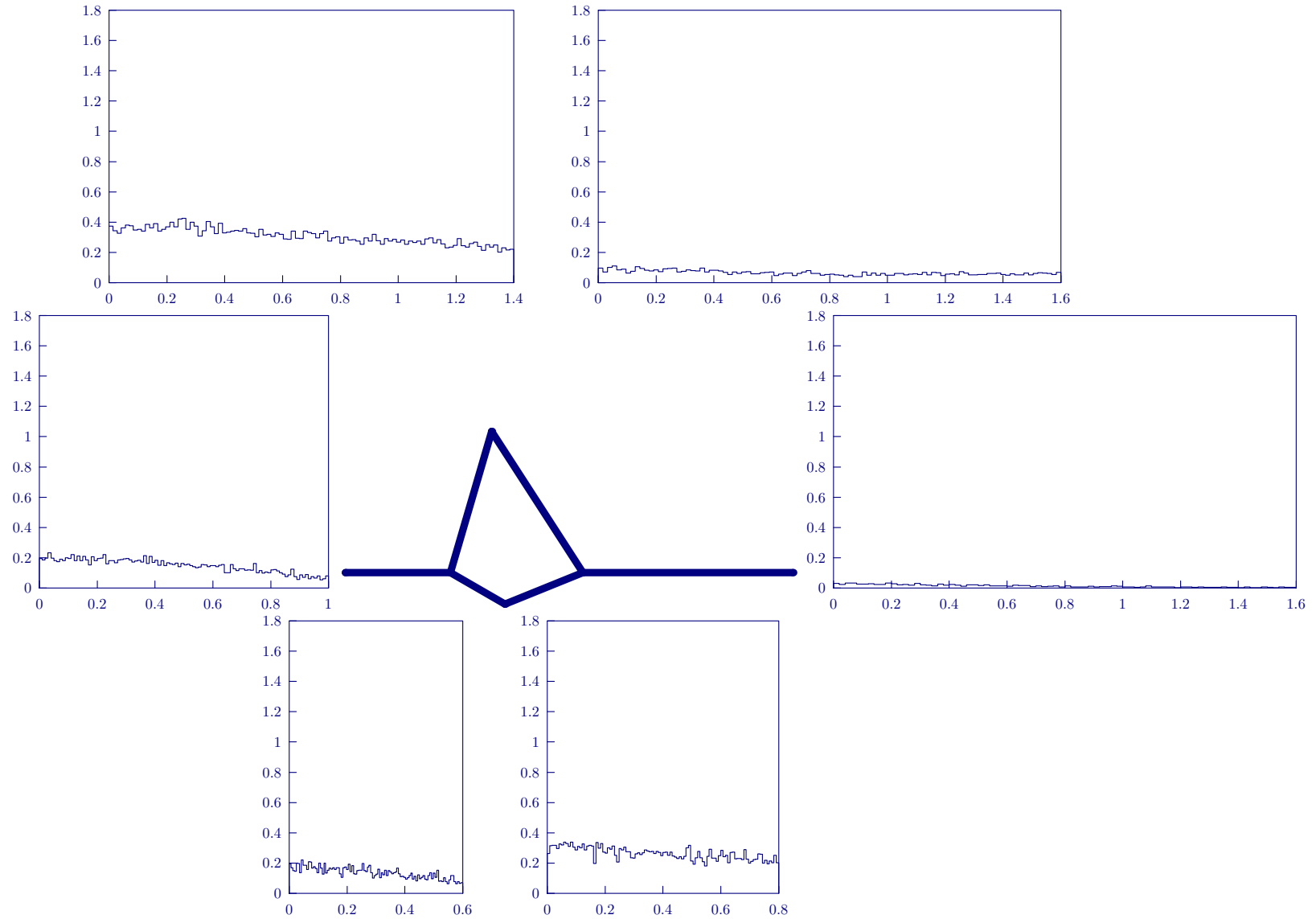
Temps=1,75



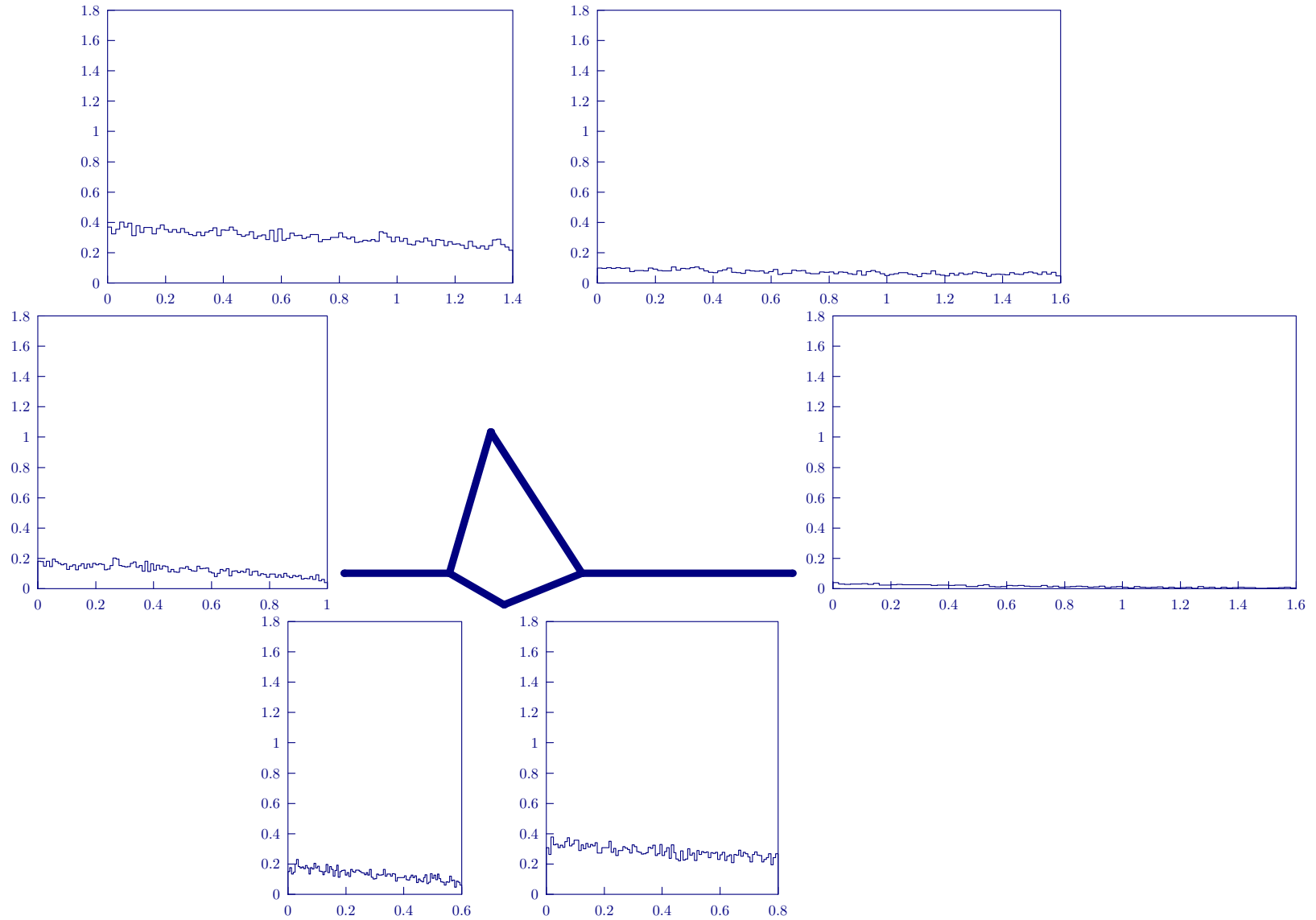
Temps=2,00



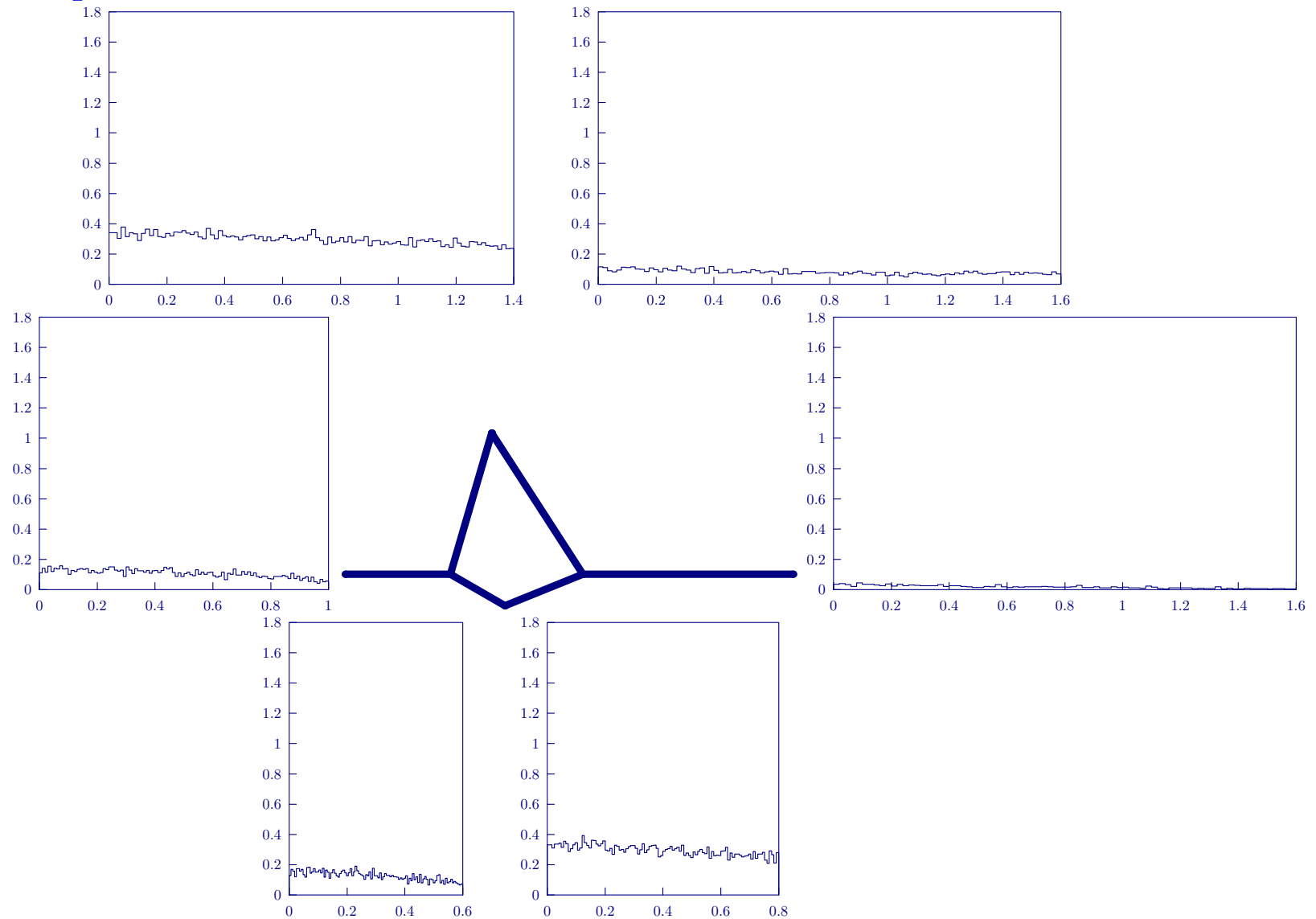
Temps=2,25



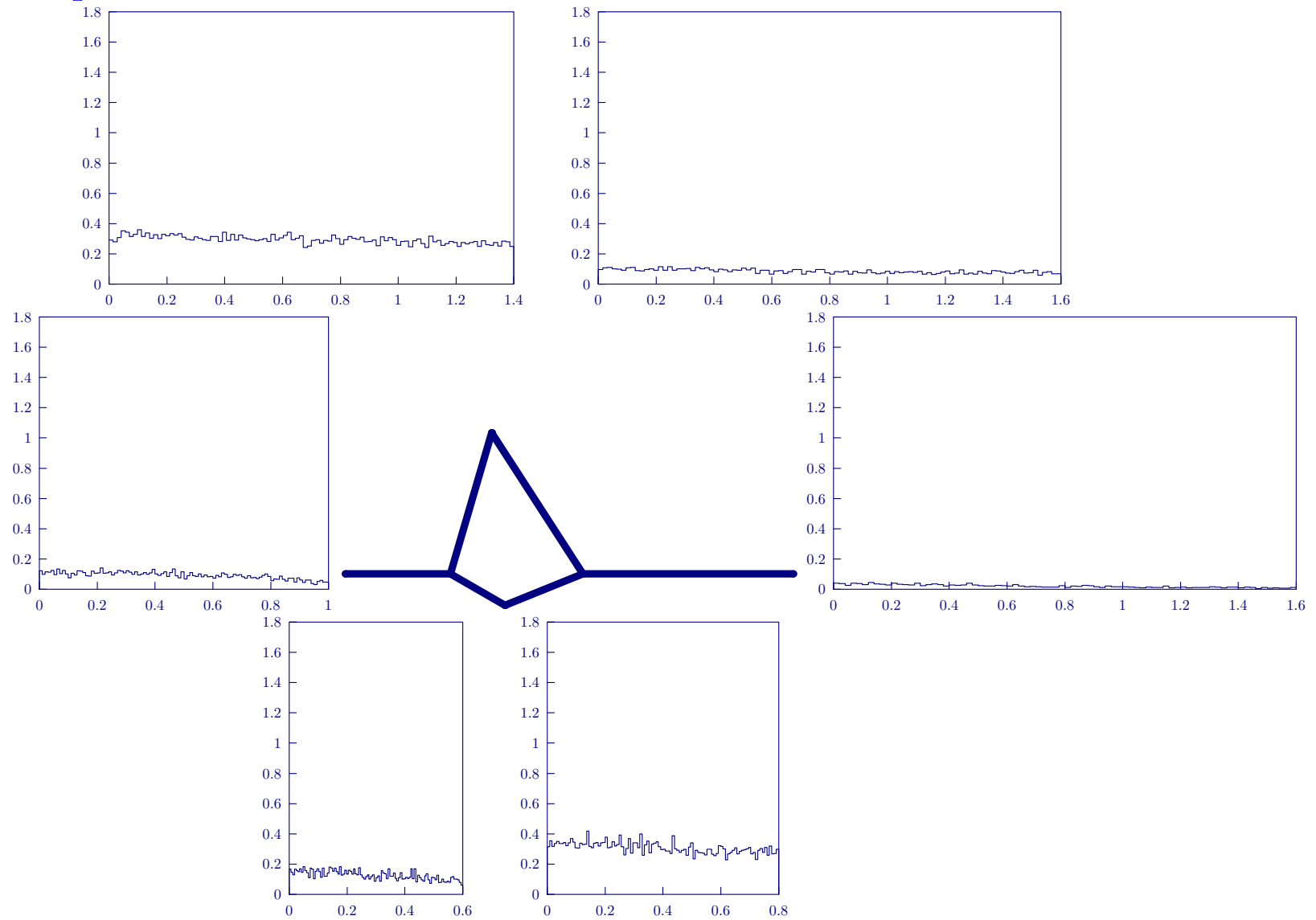
Temps=2,50



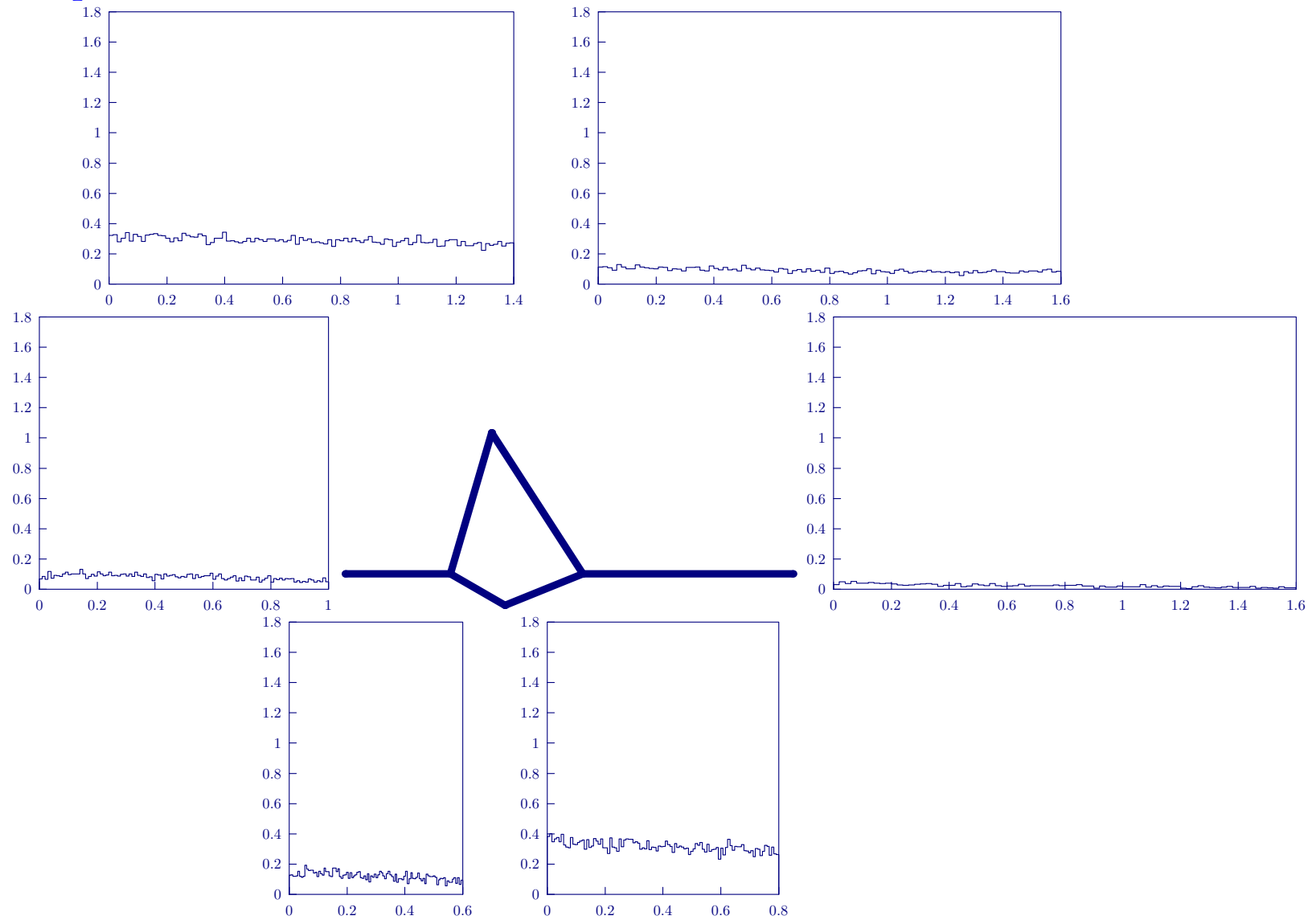
Temps=2,75



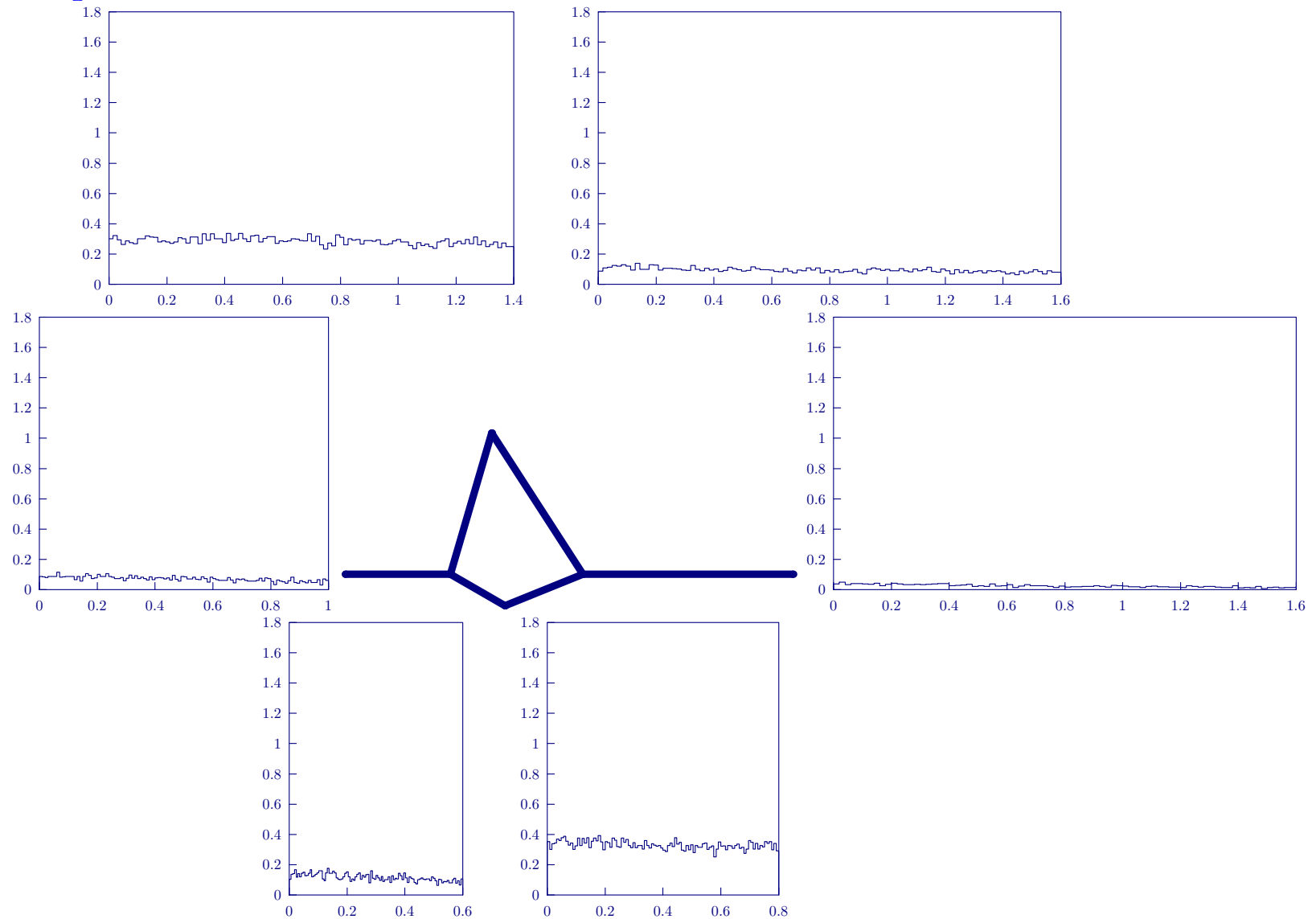
Temps=3,00



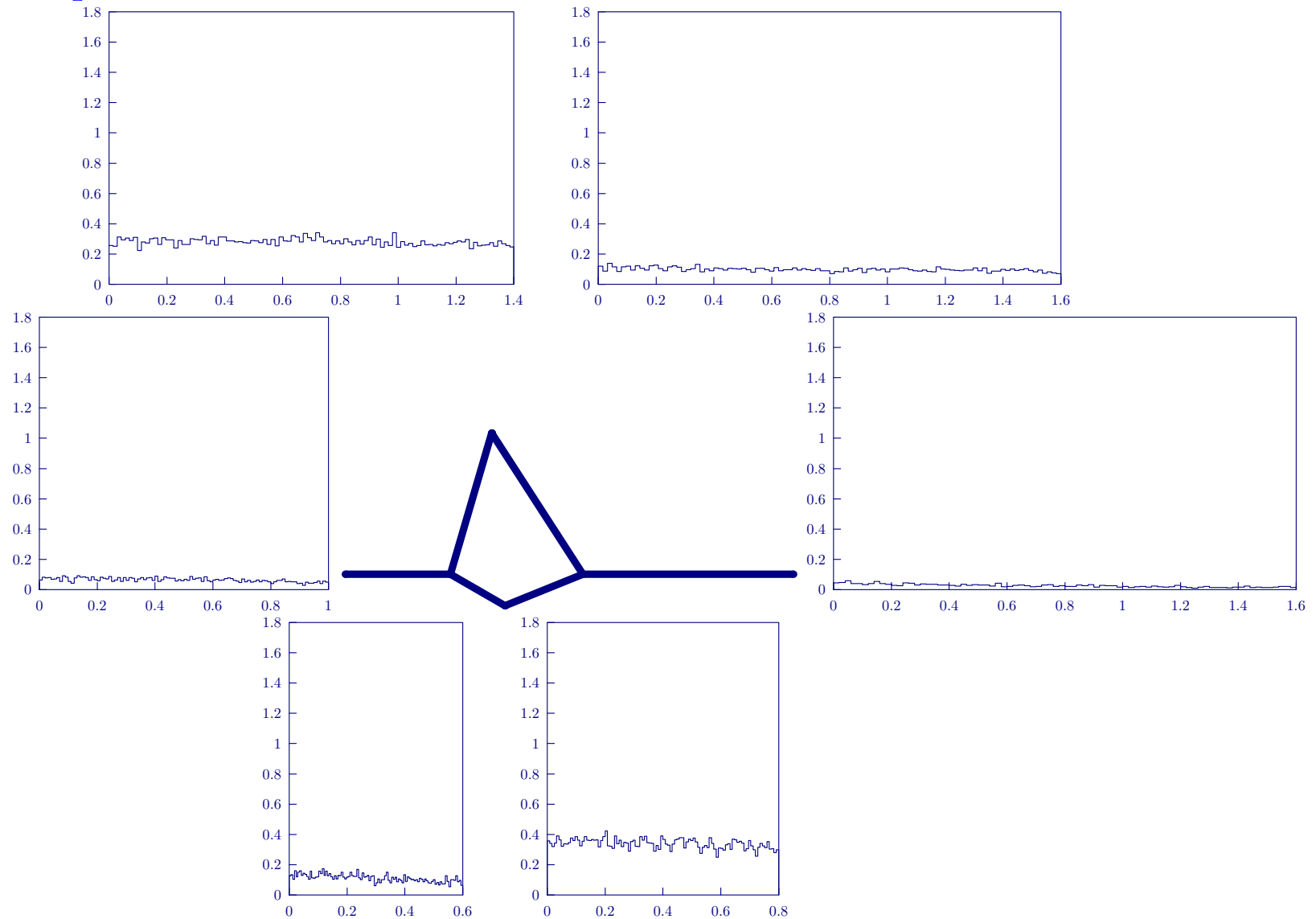
Temps=3,25



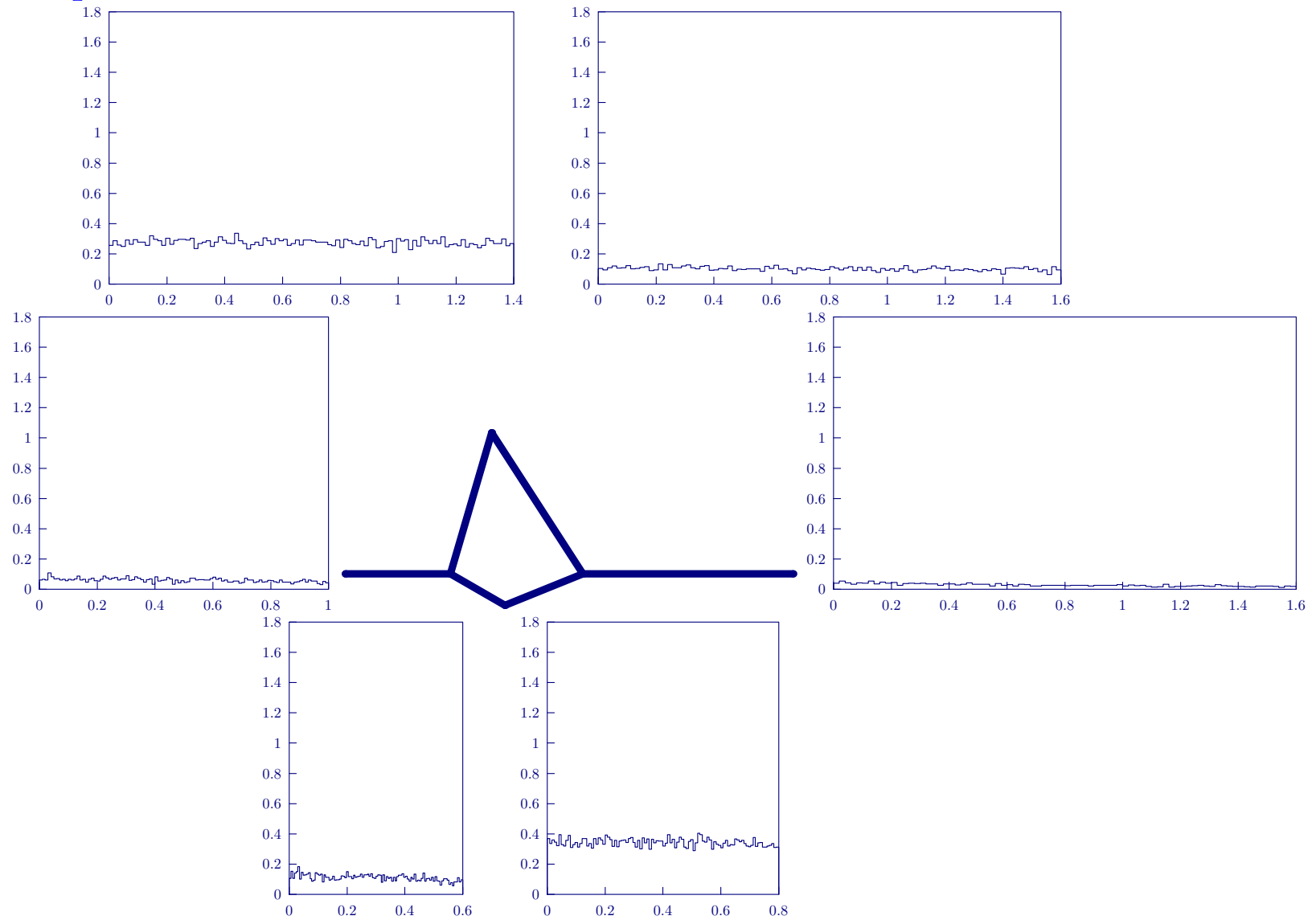
Temps=3,50



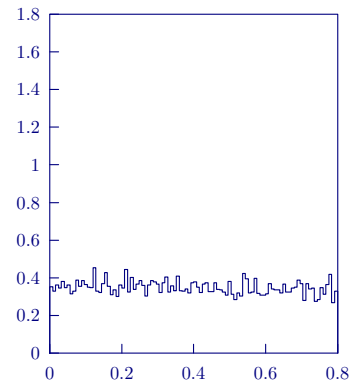
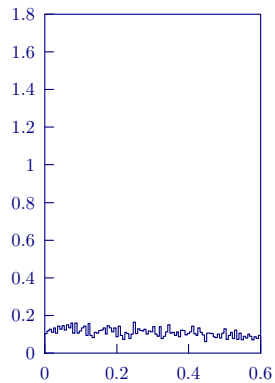
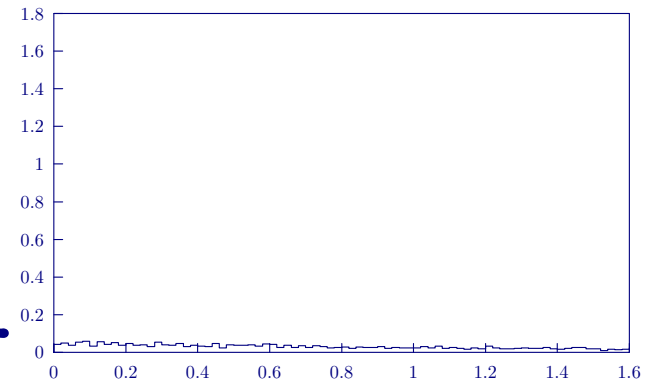
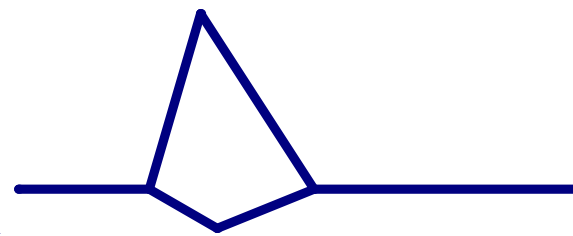
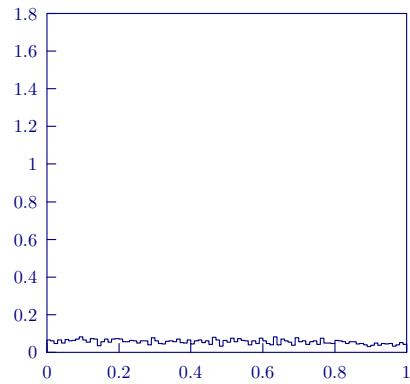
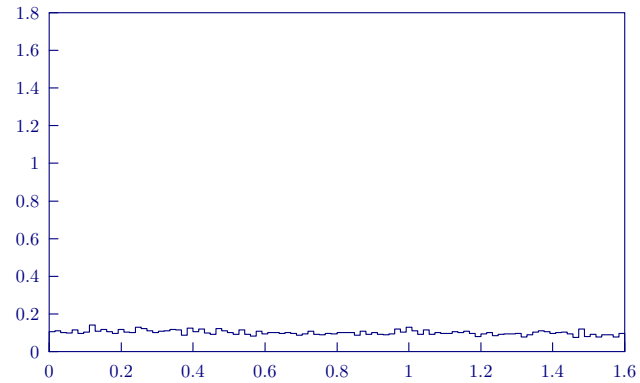
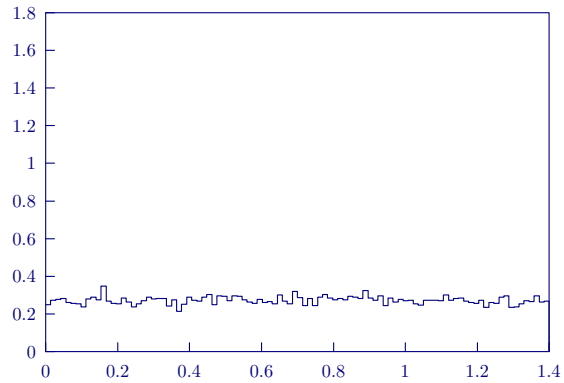
Temps=3,75



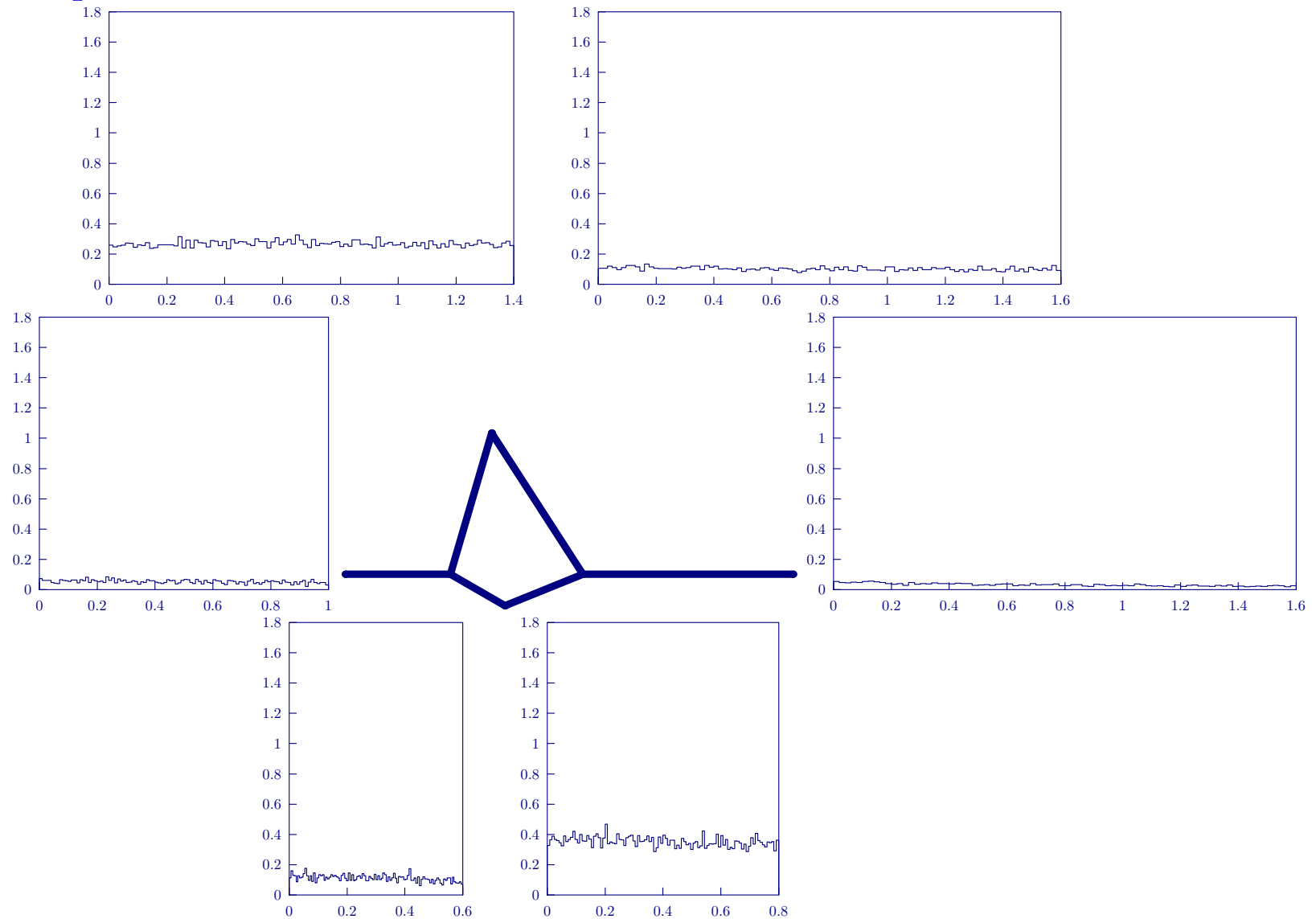
Temps=4,00



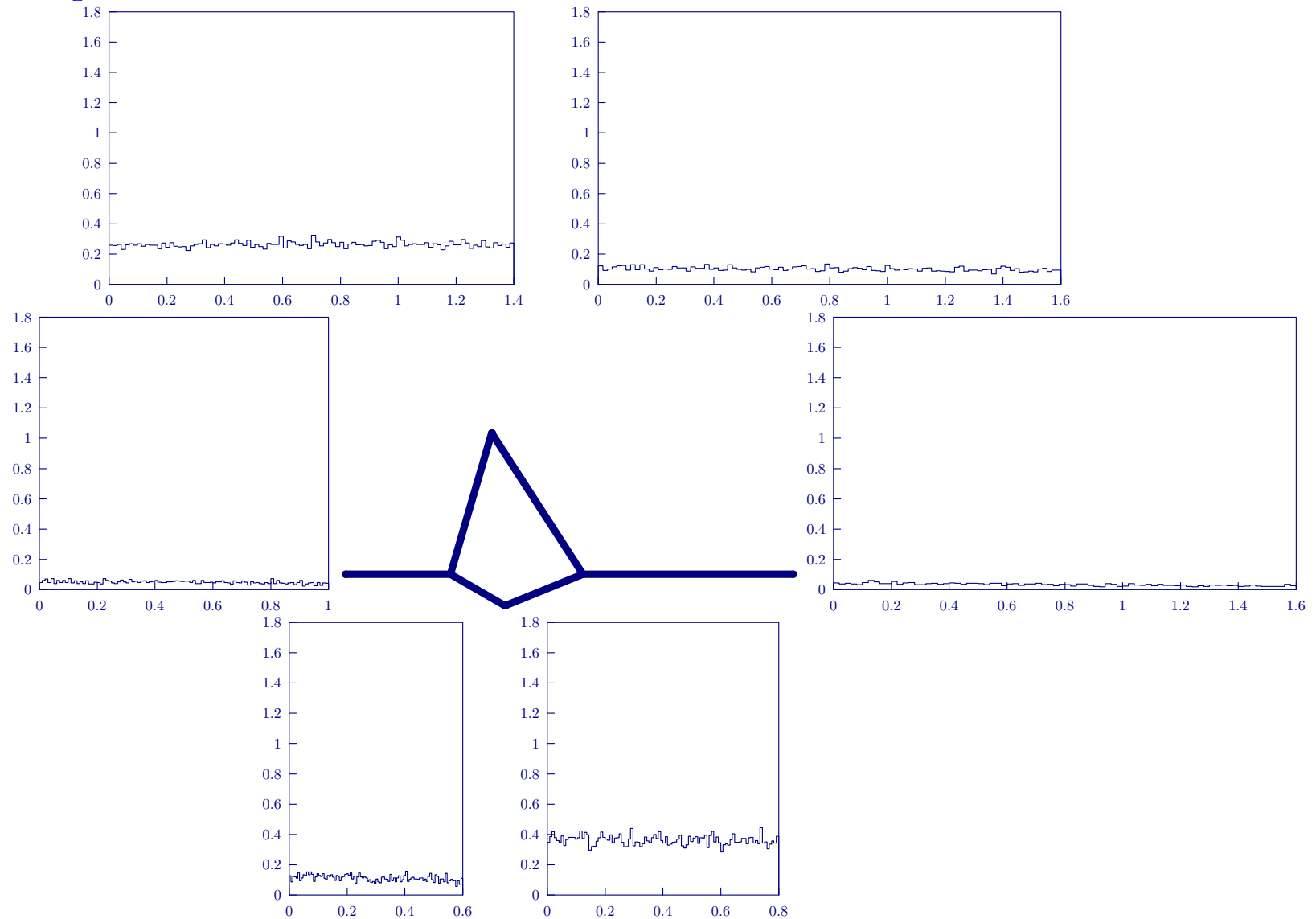
Temps=4,25



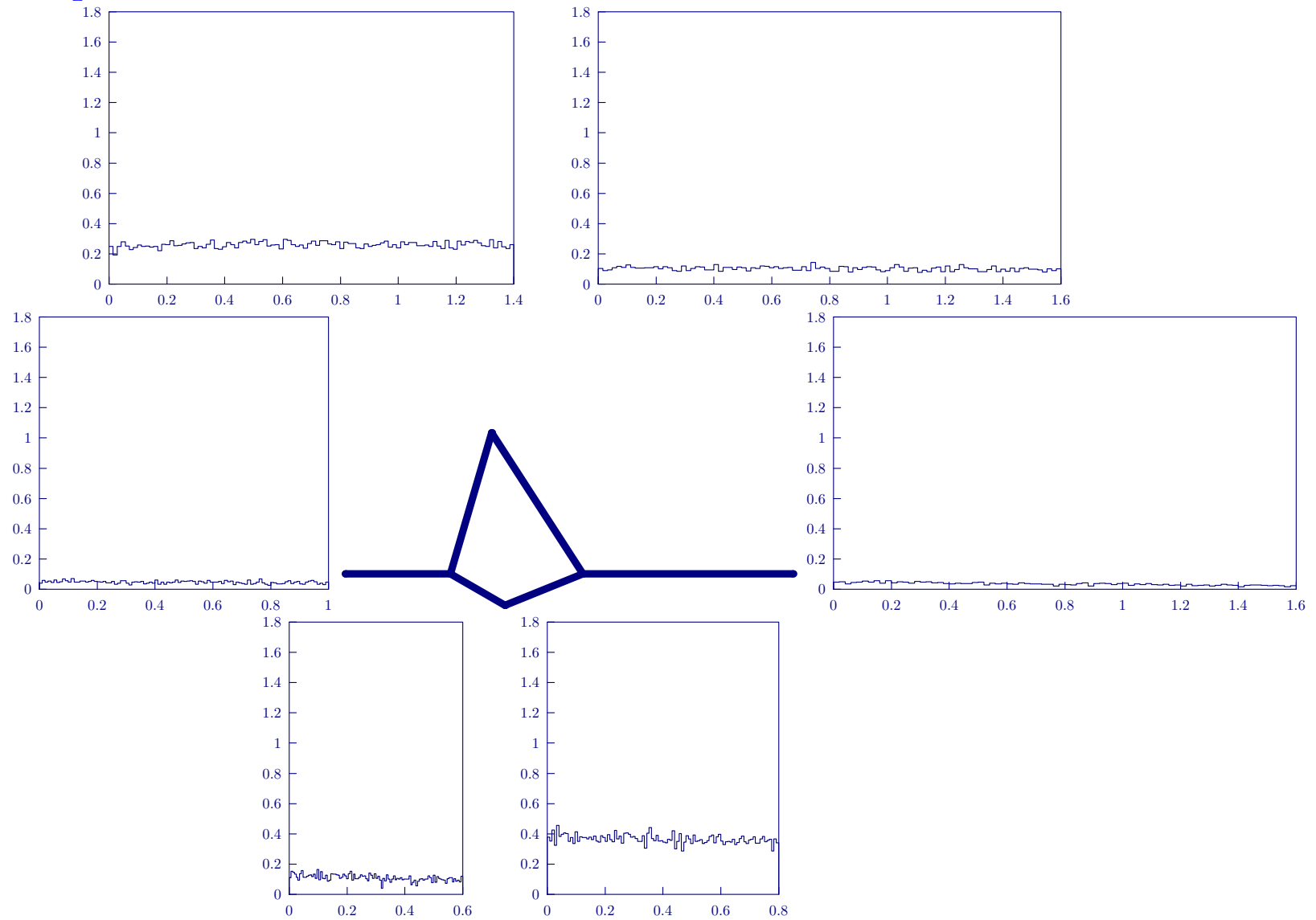
Temps=4,50



Temps=4,75



Temps=5,00



Travaux en cours et problèmes ouverts

- Temps passé dans les fissures et couplage avec un algorithme de simulation de la diffusion dans la matrice (avec J.-F. Delmas, CERMICS)
- Simulation d'un processus de diffusion de générateur infinitésimal $\text{div}(a\nabla\cdot)$ dans le cas général

Méthodes dans le cas de la dimension $d = 1$

- variation de la méthode de marche aléatoire sur les sphères
- approximation par une marche aléatoire
- schéma d'Euler (travaux de Miguel Martinez, INRIA)

Cas de la dimension $d > 1$?

- Prise en compte d'un terme convectif

⇒ thèse de Pierre Étoré (INRIA/IECN) débutée en octobre 2003

- Test des algorithmes sur des cas réels (avec J. Sausse, G2R, Nancy 1)
- Modèles de fissures plus réalistes