



Méthodes de Monte-Carlo pour les diffusions discontinues : application à la tomographie par impédance électrique

Thi Quynh Giang Nguyen

► To cite this version:

Thi Quynh Giang Nguyen. Méthodes de Monte-Carlo pour les diffusions discontinues : application à la tomographie par impédance électrique. Mathématiques [math]. Aix-Marseille Université, 2015. Français. NNT : . tel-01387004

HAL Id: tel-01387004

<https://inria.hal.science/tel-01387004>

Submitted on 25 Oct 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Aix-Marseille Université

Université de Toulon

Ecole Doctorale en Mathématiques et Informatique de Marseille

Seatech, Ecole d'ingénieurs de l'université de Toulon

LSIS/UMR 7296

Thèse présentée pour obtenir le grade universitaire de
Docteur en Science de Aix-Marseille Université

Discipline : Mathématiques Appliquées

Thi Quynh Giang NGUYEN

**Méthodes de Monte-Carlo pour les diffusions discontinues :
application à la tomographie par impédance électrique**

Soutenue le 19/10/2015 devant le jury :

M. François DELARUE	Professeur à l'université de Nice Sophia-Antipolis	Rapporteur
M. Benjamin JOURDAIN	Professeur à l'école des Ponts Paris-Tech	Rapporteur
MME. Fabienne CASTELL	Professeur à Aix-Marseille Université	Examineur
M. Christian LECOT	Professeur à l'Université de Savoie	Président
M. Antoine LEJAY	Directeur de Recherche INRIA Nancy	Examineur
M. Sylvain MAIRE	Maître de conférences HDR à l'Université de Toulon	Directeur de thèse

Remerciements

Je tiens à adresser en premier lieu mes plus chaleureux remerciements à mon directeur de thèse Sylvain Maire. J'ai pu apprécier non seulement sa dimension mathématique, mais aussi sa non moins importante dimension humaine. J'en profite pour lui exprimer ici ma plus profonde gratitude.

Je remercie très sincèrement François Delarue et Benjamin Jourdain d'avoir accepté de rapporter ma thèse et pour leurs précieuses remarques. Mes remerciements vont également à Fabienne Castell, Christian Lécot et Antoine Lejay qui m'ont fait l'honneur d'être membres de mon jury de thèse.

Je remercie tous les membres du Laboratoire LSIS Toulon pour leur soutien scientifique et pour l'ambiance au sein du laboratoire.

Je souhaite remercier Nadège Thirion Moreau pour sa gentillesse, son soutien et ses conseils scientifiques.

Je voudrais remercier le gouvernement vietnamien qui m'a financée pour mon Master 2 en France, et particulièrement DO Duc-Thai pour son soutien.

Merci à tous les thésards et les ex-thésards, les post-docs avec qui j'ai eu de la chance de partager non seulement le bureau, le couloir, mais aussi des sorties inoubliables : Cécile, Xuan, Vincente, Diogone, Jean-Philip, Victor, Manchun, Rémy, Amine, Gwen.

Je tiens à exprimer mes remerciements aux amis qui ont été comme une famille quand j'étais loin de la mienne : Huyen, Bien, Ken, Thao, Annie, Vi, Dan, Quan, Thuy, Bich...

Merci à ma famille, ma grand-mère, mon père, ma mère, mes soeurs, mon petit-frère. Sans eux, sans leurs soutiens, je ne pourrais pas avoir un jour comme aujourd'hui.

Et enfin, un grand merci à mon mari Quang et mon petit ange qui sont toujours à côté de moi.

Résumé

Cette thèse porte sur le développement de méthodes de Monte-Carlo pour calculer des représentations Feynman-Kac impliquant des opérateurs sous forme divergence avec un coefficient de diffusion constant par morceaux. Les méthodes proposées sont des variantes de la marche sur les sphères à l'intérieur des zones avec un coefficient de diffusion constant et des techniques de différences finies stochastiques pour traiter les conditions aux interfaces aussi bien que les conditions aux limites de différents types. En combinant ces deux techniques, on obtient des marches aléatoires dont le score calculé le long du chemin fourni un estimateur biaisé de la solution de l'équation aux dérivées partielles considérée. On montre que le biais global de notre algorithme est en général d'ordre deux par rapport au pas de différences finies. Ces méthodes sont ensuite appliquées au problème direct lié à la tomographie par impédance électrique pour la détection de tumeurs. Une technique de réduction de variance est également proposée dans ce cadre. On traite finalement du problème inverse de la détection de tumeurs à partir de mesures de surfaces à l'aide de deux algorithmes stochastiques basés sur une représentation paramétrique de la tumeur ou des tumeurs sous forme d'une ou plusieurs sphères. De nombreux essais numériques sont proposés et montrent des résultats probants dans la localisation des tumeurs.

Mots clés

Méthode de Monte-Carlo, Formule de Feynman-Kac, Equation de diffusion, Marche sur les sphères, Différences finies stochastiques, Tomographie par impédance électrique, Estimation de distribution.

Abstract

This thesis deals with the development of Monte-Carlo methods to compute Feynman-Kac representations involving divergence form operators with a piecewise constant diffusion coefficient. The proposed methods are variations around the walk on spheres method inside the regions with a constant diffusion coefficient and stochastic finite differences techniques to treat the interface conditions as well as the different kinds of boundary conditions. By combining these two techniques, we build random walks which score computed along the walk gives us a biased estimator of the solution of the partial differential equation we consider. We prove that the global bias is in general of order two with respect to the finite difference step. These methods are then applied for tumour detection to the forward problem in electrical impedance

tomography. A variance reduction technique is also proposed in this case. Finally, we treat the inverse problem of tumours detection from surface measurements using two stochastic algorithms based on a spherical parametric representation of the tumours. Many numerical tests are proposed and show convincing results in the localization of the tumours.

Keywords

Monte Carlo method, Feynman-Kac formula, Diffusion equations, Stochastic finite differences, Walk on spheres, Electrical Impedance Tomography, Estimation of Distribution.

Table des matières

Remerciements	iii
1 Introduction générale	1
2 La méthode de Monte-Carlo et son application à l'équation de Poisson	5
2.1 Description de la méthode de Monte-Carlo	5
2.2 Construction de générateurs de nombres aléatoires	8
2.2.1 Générateur de la loi uniforme sur $[0, 1]$	8
2.2.2 Générateurs d'autres lois	9
2.3 Réduction de variance	10
2.3.1 Variables de contrôle	10
2.3.2 Echantillonnage préférentiel	12
2.4 Méthode de Monte Carlo pour l'équation de Poisson avec des conditions de Dirichlet	13
2.4.1 Formule de Feynman-Kac pour des équations de Poisson avec des conditions aux bords de type Dirichlet	14
2.5 Le Schéma d'Euler	16
2.6 Simulation de la marche sur les sphères et calcul de son score	17
2.6.1 La marche sur les sphères	17
2.6.1.1 La fonction de Green conditionnelle	20
2.6.1.2 Méthode à un point aléatoire	21
2.6.2 Marche sur les sphères décentrée	22
2.7 La marche sur les rectangles	23
2.8 Traitement des conditions de Neumann	24
2.8.1 Schéma d'Euler réfléchi	24
2.8.2 Approximation cinétique	25
3 Méthodes de Monte-Carlo pour les équations sous forme divergence	27
3.1 Equation sous forme divergence avec conditions aux limites de Dirichlet	28
3.1.1 Schémas normaux	29
3.1.1.1 Mouvement Brownien biaisé	30
3.1.1.2 Schéma de Hoteit	30
3.1.1.3 Différences finies stochastiques	31
3.1.2 Schéma cinétique	32

3.2	Présentation générale de l'algorithme	33
3.2.1	Double randomisation	33
3.2.2	Application à la résolution de l'équation (3.1)	34
3.3	Simulation avec un terme d'amortissement	36
3.3.1	Schéma d'Euler avec amortissement	36
3.3.2	Marche sur les sphères avec amortissement	36
3.4	Différences finies stochastiques	38
3.4.1	Condition aux limites de Robin sans facteur d'amortissement	38
3.4.1.1	Approximation en dimension deux	39
3.4.1.2	Approximation en dimension trois	40
3.4.2	Etude de l'algorithme général sans terme source	41
3.4.3	Conditions de Robin avec un facteur d'amortissement	45
3.4.3.1	Approximation en dimension deux	46
3.4.3.2	Approximation en dimension trois	46
3.4.4	Conditions de transmission sans terme d'amortissement	47
3.4.4.1	Approximation en dimension deux	47
3.4.4.2	Approximation en dimension trois	47
3.4.4.3	Choix des pas de discrétisation	48
3.4.5	Conditions de transmission avec un terme d'amortissement	48
3.4.5.1	Approximation en dimension deux	49
3.4.5.2	Approximation en dimension trois	50
3.5	Résultats numériques	50
3.5.1	Problème de Robin sans terme d'amortissement	50
3.5.1.1	Description de l'algorithme	51
3.5.1.2	Analyse du biais	51
3.5.1.3	Comparaison entre UWOS et WOS	52
3.5.2	Problème de Robin avec un terme de source	53
3.5.2.1	Cas test sans terme d'amortissement	53
3.5.2.2	Cas test avec un terme d'amortissement	54
3.5.3	Problème de transmission en dimension trois	55
3.5.4	Equation de Poisson-Boltzmann avec une seule sphère	55
3.6	Conclusion	57
4	Problème direct en tomographie par impédance électrique	61
4.1	Mise en équation	62
4.2	Le problème de Calderón	62
4.3	Le modèle des électrodes	64
4.3.1	Modèle avec espacement	64
4.3.2	Modèle avec dérivation	65
4.3.3	Modèle complet	65
4.4	Modélisation de tumeurs	65
4.4.1	Cas d'une seule inclusion	65
4.4.2	Modèle simple couche	66
4.4.3	Modèle double couche	67
4.4.4	Le calcul de la constante sur l'inclusion	67

4.4.5	Cas de plusieurs inclusions	70
4.5	Analyse du biais pour un modèle unidimensionnel	70
4.6	Réduction de variance	73
4.7	Validation de l'analyse du biais	76
4.7.1	Modèle simple couche	76
4.7.1.1	La mesure idéale	76
4.7.1.2	La mesure discrète	78
4.7.2	Modèle double couche	79
4.8	Etude numérique de la méthode de réduction de variance	81
4.8.1	Cas d'une inclusion en dimension deux	84
4.8.2	Cas de deux inclusions en dimension deux	85
4.8.3	Cas d'une inclusion en dimension trois	86
4.8.3.1	Quantification sur la demi-sphère	87
4.8.3.2	Résultats numériques	88
4.9	Conclusion	89
5	Problème inverse en tomographie par impédance électrique	91
5.1	Introduction	91
5.2	Description du problème inverse	92
5.2.1	Un exemple d'instabilité en dimension un	93
5.3	L'algorithme à estimation de distribution	94
5.3.1	Principe général	94
5.3.1.1	Application à la résolution du problème inverse	94
5.4	L'algorithme mimétique	95
5.5	Résultats numériques	96
5.5.1	Détection d'une seule inclusion par l'algorithme à estimation de distribution	96
5.5.2	Etude des paramètres de convergence de l'EDA	100
5.5.3	Reconstruction de l'inclusion avec des mesures bruitées	101
5.5.4	Reconstruction additionnelle des conductivités	102
5.5.5	Détection d'une tumeur par la méthode mimétique	105
5.5.6	Détection de deux inclusions	108
5.6	Conclusion	111

Chapitre 1

Introduction générale

Les phénomènes de diffusion interviennent dans de nombreux domaines de la physique comme la thermique, la résistance des matériaux ou encore l'électro-encéphalographie. Ils sont également très présents en biologie, en chimie ou encore dans le domaine des mathématiques financières. Leurs modélisations font souvent intervenir des équations aux dérivées partielles dont le prototype est l'équation de Laplace pour les diffusions spatialement homogènes.

La résolution numérique de ces équations peut s'effectuer par un très grand nombre de méthodes déterministes ou stochastiques dont la pertinence dépend de la nature et de la dimension de l'équation considérée. Les méthodes déterministes de type éléments finis sont en général utilisées pour le calcul de la solution globale de l'équation en des points d'une grille. Ces méthodes sont basées sur une formulation variationnelle pour laquelle les solutions du problème vérifient des conditions d'existence plus faibles que celles du problème initial et où un maillage permet de trouver une solution approchée. La qualité de la solution dépend de la qualité du maillage. Un maillage raffiné est nécessaire à l'obtention d'un résultat fiable. Les méthodes de Monte-Carlo pour résoudre ces équations se basent sur la simulation de processus de diffusion via différents schémas comme le schéma d'Euler. Dans le cas de l'équation de Laplace, le processus à simuler est le mouvement Brownien. Il existe des méthodes très efficaces de simulation de ce mouvement Brownien de type marche sur les sous-domaines par exemple la marche sur les sphères (WOS en anglais) ou moins classiquement la marche sur les rectangles (WOR en anglais). Les méthodes de Monte-Carlo sont moins précises que les méthodes de type éléments finis mais elles peuvent donner une solution approchée en un point du domaine ou encore la moyenne de la solution sur une zone sans faire de maillage. Elles sont peu sensibles à la dimension et à la géométrie du problème, sont faciles à programmer et se parallélisent très facilement. Elles sont donc plutôt utilisées en grande dimension ou pour le calcul de la solution en quelques points du domaine ou de sa moyenne sur une partie du domaine. L'inconvénient majeur de cette méthode est une vitesse de convergence très lente et on ne peut pas obtenir un résultat précis sans un effort de calcul important. De nombreuses méthodes de réduction de variance sont proposées pour remédier à cet inconvénient.

L'objectif de cette thèse est de proposer de nouveaux schémas pour résoudre des équations impliquant des opérateurs de diffusion dans un domaine hétérogène de la forme

$$-\frac{1}{2}\nabla(a\nabla u)(x) + \lambda(x)u(x)$$

avec tous types de conditions aux bords : Dirichlet, Neumann et de façon plus générale des conditions de type Robin. Ensuite, nous appliquerons ces nouveaux schémas à la résolution d'un problème direct en tomographie par impédance électrique intitulé modèle des électrodes complet. Pour cette application, nous nous concentrons sur la détection de tumeurs cancéreuses dans le sein à partir de potentiels mesurés sur les électrodes attachées sur la peau. D'un point de vue mathématique, le calcul des potentiels sur ces électrodes équivaut à calculer la moyenne sur les électrodes de la solution d'une équation de diffusion avec certaines conditions aux bords particulières. Cela justifie que nous n'ayons pas forcément besoin de connaître la solution partout dans le domaine. De plus dans le cadre de la résolution de problèmes inverses, on peut être amené à calculer un grand nombre de fois la solution de problèmes directs. Dans ce type de cas, la méthode de Monte-Carlo peut donc s'avérer une alternative très efficace. Nous allons maintenant décrire l'organisation du manuscrit.

Dans le deuxième chapitre, nous rappelons les principes de base de la méthode de Monte-Carlo et ses applications à l'intégration numérique et à la résolution d'équations aux dérivées partielles. Les techniques usuelles de réduction de variance seront décrites dans le cas de l'intégration numérique. Un soin particulier sera porté à la description des outils probabilistes pour résoudre des équations de Poisson avec des conditions aux bords de type de Dirichlet et Neumann comme la formule de Feynman-Kac, le schéma d'Euler, la marche sur les sphères ou la marche sur les rectangles.

Dans le troisième chapitre, nous commençons par rappeler les différents schémas classiques pour simuler les processus stochastiques liés aux opérateurs présentant un coefficient de diffusion constant par morceaux. Ensuite, nous introduisons de nouvelles méthodes de Monte-Carlo efficaces pour résoudre des équations aux dérivées partielles elliptiques en dimension deux et trois avec un coefficient de diffusion constant par morceaux, mais aussi des conditions aux bords de type Robin et également un terme d'amortissement. Ces méthodes sont basées sur l'évolution d'une marche aléatoire et de son score à l'intérieur de sous-domaines et de déplacements aux interfaces et aux bords du domaine. Le mouvement à l'intérieur d'un sous-domaine se fait grâce à la marche sur les sphères standard ou d'une variante développée spécialement dans le cas où il y a à la fois un terme d'amortissement et un terme source. Pour traiter les déplacements à l'interface ou aux bords du domaine, nous développons des techniques de différences finies stochastiques. Ces techniques constituent une amélioration des schémas usuels car l'ordre du biais à chaque déplacement est plus élevé (ordre trois pour les nouveaux schémas au lieu de deux habituellement). Dans le cas particulier de l'opérateur Laplacien avec des conditions de Robin partout sur le bord, nous effectuons une analyse du biais et de la variance de l'algorithme complet. De nombreux tests numériques montrent que le biais global de l'algorithme est d'ordre deux.

Le quatrième chapitre est consacré à un exemple d'application des équations sous forme divergence : la modélisation d'une tumeur cancéreuse dans un sein dans le cadre de la tomographie par impédance électrique. Dans ce modèle appelé modèle des électrodes complet, le sein est divisé en deux zones avec des coefficients de diffusion différents (conductivités électriques), une fine couche de peau et une couche de gras. Des électrodes sont attachées à différentes zones de la surface de la peau. Ces zones sont modélisées par des conditions de Robin et le reste de la peau par des conditions de Neumann. La tumeur est supposée sphérique et la conductivité à l'intérieur de celle-ci infinie car la conductivité y est beaucoup plus

grande que dans la couche de gras. Ceci permet également de modéliser les conditions au bord de la tumeur par une constante obtenue grâce à la conservation de la charge. Dans le cas de plusieurs tumeurs, la conductivité à l'intérieur des tumeurs est choisie beaucoup plus grande que dans le gras mais reste finie. Le problème direct consiste à estimer les intensités moyennes sur chaque électrode en connaissant la distribution de conductivité, la localisation de la tumeur et la tension sur ces mêmes électrodes. Après avoir rappelé les résultats d'existence et d'unicité de ce modèle, nous étudions le biais de notre algorithme pour un modèle en dimension un avec une condition de Neumann à une extrémité et de Robin sur l'autre extrémité. Nous montrons théoriquement que sur cet exemple le biais global de l'algorithme est toujours d'ordre deux. Nous reprenons ensuite l'étude du biais et de la variance pour un cas-test en dimension deux où le sein est modélisé par deux couches concentriques et la tumeur par un disque. Cette étude numérique montre que le biais est toujours d'ordre deux pour un modèle régularisé mais un peu moins que deux pour celui des électrodes. Un modèle en trois dimensions sur une demi-sphère est aussi étudié. Tous nos tests numériques comportent une comparaison avec une résolution par une méthode d'éléments finis programmée à l'aide du logiciel Freefem++. Afin de réduire la variance, nous utilisons aussi la solution du problème sans tumeur donnée par ce logiciel comme une variable de contrôle de la solution du problème avec la tumeur. Cette technique permet de réduire la variance de manière très significative. Une autre version purement stochastique de cette idée est également proposée ainsi que la parallélisation des différents algorithmes à l'aide de l'interface de programmation Openmp.

Le dernier chapitre traite de la détection de la tumeur à partir des intensités moyennes mesurées sur les N électrodes dans $N - 1$ configurations linéairement indépendantes. Il s'agit donc d'un problème inverse dont nous commençons par rappeler les caractéristiques en terme d'unicité et de stabilité. Pour sa résolution, nous proposons deux nouvelles approches paramétriques fondées sur des algorithmes stochastiques. Dans un premier temps nous considérons la détection d'une seule tumeur circulaire dans un milieu où les conductivités sont connues en dehors de la tumeur et où seuls le rayon et la position de celle-ci sont inconnus. Les deux algorithmes stochastiques reposent sur le même principe : créer une population de candidats dont la distribution (destinée à converger vers la solution) va évoluer en fonction de celle de meilleurs candidats. Ces meilleurs candidats sont ceux dont la fonction coût qui mesure l'écart quadratique entre les intensités mesurées et les intensités estimées est la plus petite. Le premier algorithme repose sur l'estimation de distribution où les trois inconnues (rayon et coordonnées de l'inclusion) sont paramétrisées par des lois uniformes indépendantes qui évoluent comme une combinaison linéaire entre la loi actuelle et la loi empirique des meilleurs candidats. Le deuxième algorithme est un algorithme mimétique qui met en compétition les différentes candidats à l'aide de duels et dont la phase de recherche se fait grâce à un mouvement Brownien à pas décroissant. Les deux algorithmes fournissent des résultats très précis surtout grâce aux techniques de réduction de variance développées dans le chapitre précédent. Nous appliquons finalement ces algorithmes à des problèmes plus compliqués où les conductivités dans les couches de peau et de gras sont également inconnues et où il peut y avoir plusieurs tumeurs.

La méthode de Monte-Carlo et son application à l'équation de Poisson

2.1 Description de la méthode de Monte-Carlo

Les méthodes de Monte-Carlo ([26],[48]) désignent un ensemble de méthodes numériques qui reposent sur des nombres aléatoires. Nous allons dans cette thèse nous intéresser principalement à la méthode de Monte-Carlo standard qui consiste à approcher numériquement une quantité déterministe après avoir écrit celle-ci comme l'espérance $\mathbb{E}(X)$ d'une certaine variable aléatoire X . La méthode de Monte-Carlo s'appuie sur la loi des grands nombres qui affirme que la moyenne empirique de la variable aléatoire X converge vers son espérance $\mathbb{E}(X)$. La loi forte des grands nombres [53] pour des variables intégrables s'énonce de la façon suivante :

Théorème 1. *Soit $(X_i, i \geq 1)$ une suite de variables aléatoires dans $\mathbb{R}$ indépendantes suivant toutes la même loi qu'une variable aléatoire X . On suppose que $\mathbb{E}(|X|) < +\infty$. Alors, pour presque tout ω :*

$$\mathbb{E}(X) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} (X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega)).$$

La formule précédente nous fournit un estimateur de $\mathbb{E}(X)$ mais il ne nous dit pas à quelle vitesse cet estimateur converge ce qui est crucial d'un point de vue numérique. Autrement dit, il faut étudier le comportement de l'erreur

$$\varepsilon_n = \mathbb{E}(X) - \frac{1}{n} (X_1 + \dots + X_n)$$

en fonction de n . Cette question est résolue par le théorème de limite central qui donne le comportement asymptotique de l'erreur ε_n sous l'hypothèse supplémentaire de l'existence d'un moment d'ordre 2 pour X . Il peut s'énoncer comme suit

Théorème 2. *Soit $(X_i, i \geq 1)$ une suite de variables aléatoires dans $\mathbb{R}$ indépendantes suivant toutes la même loi qu'une variable aléatoire X . On suppose que $\mathbb{E}(X^2) < +\infty$. On note*

$$\sigma^2 = \mathbb{E}(X - \mathbb{E}(X))^2 = \mathbb{E}(X^2) - \mathbb{E}(X)^2$$

la variance de X . On suppose que $\sigma > 0$, alors la variable aléatoire $\frac{\sqrt{n}}{\sigma} \varepsilon_n$ converge en loi vers une variable aléatoire G suivant une loi gaussienne centrée réduite de densité $\frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$. Si f est une fonction continue bornée, $\mathbb{E}(f(\frac{\sqrt{n}}{\sigma} \varepsilon_n))$ converge vers $\mathbb{E}(f(G)) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$.

On va se servir de ce théorème pour construire un intervalle de confiance pour la quantité $\mathbb{E}(X)$. En effet pour n suffisamment grand la variable aléatoire

$$T = \frac{\sqrt{n}}{\sigma} \varepsilon_n$$

suit une loi normale centrée réduite. Par conséquent comme

$$\mathbb{P}(-1.96 \leq T \leq 1.96) = \int_{-1.96}^{1.96} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \simeq 0.95,$$

on obtient en notant $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(-1.96 \leq \frac{\sqrt{n}\varepsilon_n}{\sigma} \leq 1.96) &\simeq 0.95 \\ \Leftrightarrow \mathbb{P}\left(-\frac{1.96\sigma}{\sqrt{n}} \leq \varepsilon_n \leq \frac{1.96\sigma}{\sqrt{n}}\right) &\simeq 0.95 \\ \Leftrightarrow \mathbb{P}\left(-\frac{1.96\sigma}{\sqrt{n}} + \bar{X} \leq \mathbb{E}(X) \leq \frac{1.96\sigma}{\sqrt{n}} + \bar{X}\right) &\simeq 0.95 \end{aligned}$$

et on a donc l'intervalle de confiance à 95%

$$\left[\frac{-1.96\sigma}{\sqrt{n}} + \bar{X}, \frac{1.96\sigma}{\sqrt{n}} + \bar{X}\right]$$

pour $\mathbb{E}(X)$. En général, σ n'est pas connu. En pratique, on remplace σ par son estimateur empirique s défini par

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n X_i^2 - n\bar{X}^2 \right).$$

On a les propriétés suivantes : s^2 est un estimateur sans biais de σ^2 et s^2 tend vers σ^2 presque sûrement quand n tend vers $+\infty$. L'expression $\frac{1}{n-1} \left(\sum_{i=1}^n X_i^2 - n\bar{X}^2 \right)$ permet de calculer facilement s^2 numériquement à l'aide d'un programme. Si on remplace σ par s dans la définition de T , la variable aléatoire obtenue suit une loi de Student à $n-1$ degrés de liberté [86] si X est une Gaussienne. Si X suit une loi quelconque, cette loi tend vers une Gaussienne pour n assez grand ce qui sera toujours le cas dans la suite. On peut donc remplacer σ par s dans la formule précédente pour obtenir l'intervalle de confiance asymptotique à 95 %

$$\left[\frac{-1.96s}{\sqrt{n}} + \bar{X}, \frac{1.96s}{\sqrt{n}} + \bar{X}\right].$$

Exemple 1. Calcul d'aires Nous voulons calculer l'aire S d'un domaine D inclus dans le carré $[0, 1] \times [0, 1]$ qui est délimité par une courbe $f(x, y) = 0$ où les points qui appartiennent au domaine sont ceux tels que $f(x, y) < 0$. On effectue n lancers uniformément dans le carré

et on note n_1 le nombre de fois où l'on tombe dans D . On va montrer que $\frac{n_1}{n}$ tend vers S quand n tend vers $+\infty$.

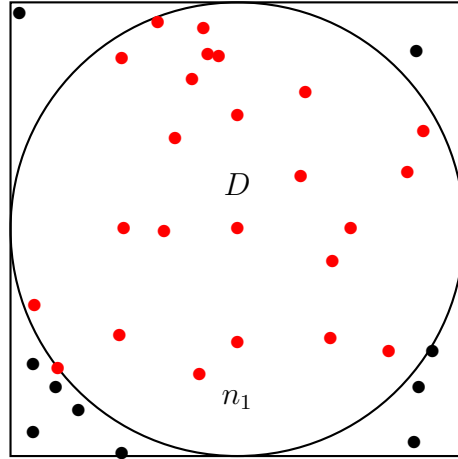


FIGURE 2.1 – Calcul Monte-Carlo de la surface d'un cercle

On définit les variables aléatoires

$$Z_i = 1_{\{f(X_i, Y_i) < 0\}}, \quad i = 1, \dots, n$$

où le couple (X_i, Y_i) suit une loi uniforme sur $[0, 1] \times [0, 1]$. On a évidemment $\sum_{i=1}^n Z_i = n_1$ et

$$E(Z_i) = P(f(X_i, Y_i) < 0) = \int_0^1 \int_0^1 1_{\{f(x, y) < 0\}} dx dy = S.$$

En appliquant la loi des grands nombres, nous avons

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^n Z_i}{n} = E(Z) = S$$

et l'intervalle de confiance à 95%

$$\left[\frac{-1.96s}{\sqrt{n}} + \frac{n_1}{n}, \frac{1.96s}{\sqrt{n}} + \frac{n_1}{n} \right]$$

où

$$s^2 = \frac{n_1}{n-1} \left(1 - \frac{n_1}{n} \right).$$

La figure 2.1 montre l'exemple de l'application de cette méthode au cas du cercle centré en $(0.5, 0.5)$ et de rayon 0.5. La fonction f vaut

$$f(x, y) = (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 - 0.25.$$

Le rapport $\frac{n_1}{n}$ tend vers $\frac{\pi}{4}$ et donc $\frac{4n_1}{n}$ fournit une approximation de π .

L'exemple de calcul de surface exprime très bien les avantages et les inconvénients de la méthode de Monte-Carlo. Elle ne dépend pas de la régularité de la fonction f qui définit la surface. La méthode est très simple, très facile à mettre en oeuvre et peut s'étendre aisément à des problèmes en plus grande dimension. Elle est souvent utilisée dans le calcul numérique d'intégrales en dimension plus élevée qu'un ou dans la résolution d'équations aux dérivées partielles, ainsi que dans beaucoup d'applications de mathématiques financières par exemple l'évolution des prix dans le modèle Black et Scholes ([8],[32],[53]). Un gros avantage de la méthode de Monte-Carlo est sa parallélisation complètement naturelle. Ceci est d'autant plus important avec le développement des cartes graphiques de type GPU. Nous utiliserons ces techniques de parallélisation dans le chapitre 5.

L'inconvénient majeur de cette méthode est sa vitesse de convergence très lente donnée par $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ qui ne permet pas d'obtenir une bonne précision sans un effort de calcul important. Deux pistes principales sont explorées pour pallier cet inconvénient. La première est l'utilisation de suites qui sont mieux réparties dans l'espace suivant certains critères que les nombres pseudo-aléatoires. On peut citer les suites quasi-Monte Carlo où la discrétion est faible qui sont construites afin de minimiser la discrétion. Ces suites permettent d'obtenir une vitesse de convergence accrue en dimension d qui vaut par exemple $\frac{(\log n)^{d-1}}{n}$ en particulier pour l'intégration numérique ([25],[79]). La technique de quantification repose sur la même idée mais les points construits sont issus de la minimisation d'un critère quadratique appelé distortion. Les formules d'intégration s'y rattachant peuvent être plus efficaces que les précédentes en petite dimension ([80],[81]). L'inconvénient de cette méthode est que pour chaque formule de quadrature les points et les poids doivent être calculés à l'aide d'un algorithme. Nous verrons au chapitre 4 un exemple d'application de cette méthode et de cet algorithme où il s'agira de placer des points uniformément sur une demi-sphère.

L'autre technique consiste à réduire la variance σ^2 en construisant une variable aléatoire ayant même espérance que celle de départ mais avec une variance plus petite. Nous discuterons plus en détail de cette technique dans la section (2.3).

2.2 Construction de générateurs de nombres aléatoires

2.2.1 Générateur de la loi uniforme sur $[0, 1]$

Pour mettre en oeuvre la méthode de Monte-Carlo, il faut être capable de générer des nombres au hasard. Même s'il existe des générateurs physiques basés par exemple sur l'horloge de l'ordinateur, la plupart des nombres au hasard sont construits à l'aide de nombres pseudo-aléatoires qui appartiennent en fait à des suites déterministes. La qualité de ces suites se mesure par des tests statistiques sur l'adéquation avec la loi à simuler et par l'étude des corrélations entre les différents termes de la suite.

Avant de simuler une loi quelconque, on commence par simuler la loi uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Nous allons décrire le principe du générateur linéaire qui sera utilisé dans cette thèse. On se donne $x_0 \in \mathbb{N}$ la racine du générateur, un nombre premier M très grand et deux paramètres $a, b \in \mathbb{N}$. Nous définissons alors une suite d'entiers

$$x_{n+1} = ax_n + b \pmod{M}$$

qui donne un nombre entier pseudo-aléatoire entre 0 et $M - 1$. Le nombre aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ s'obtient donc par $u_n = \frac{x_n}{M}$. Les choix des différents paramètres sont cruciaux pour assurer de bonnes propriétés statistiques. On voit par exemple que si on choisit a trop petit, plusieurs valeurs consécutives des u_n peuvent être proches les unes des autres ce qui n'est pas bon en terme de corrélation. Le choix de a se fait donc en général dans $[\sqrt{M}, M - \sqrt{M}]$. Le choix de x_0 peut influencer grandement sur la période de générateur. Nous utilisons dans cette thèse les paramètres recommandés dans [83] :

$$\begin{cases} x_0 = 51477 \\ a = 16807 \\ b = 0 \\ M = 2147483647 \end{cases}$$

Pour réduire encore plus les corrélations, il existe une technique de brassage qui consiste à ranger les nombres aléatoires dans un tableau et à tirer au hasard (à l'aide d'un autre générateur aléatoire) le nombre suivant parmi les éléments de ce tableau. Cette technique ne sera pas utilisée ici.

2.2.2 Générateurs d'autres lois

Nous venons de décrire comment simuler une loi uniforme sur $[0, 1]$. Pour simuler d'autres lois, nous allons rappeler dans le lemme suivant la méthode d'inversion de la fonction de répartition que nous allons souvent utiliser dans la suite.

Lemme 1. *Soit X une variable aléatoire réelle de fonction de répartition $F(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$, dont l'inverse généralisé (appelé quantile) est défini par $F^{-1}(u) = \inf\{x : F(x) \geq u\}$. Alors*

$$F^{-1}(U) \stackrel{\text{loi}}{=} X.$$

Inversement, si F est continue, alors $F(X) \stackrel{\text{loi}}{=} U([0, 1])$.

La démonstration de ce lemme peut se trouver dans [34].

Exemple 2. Loi exponentielle.

Soit X une variable aléatoire suivant la loi exponentielle de paramètre λ . Sa densité est donnée par

$$f(x) = \lambda \exp(-\lambda x) 1_{\{x \geq 0\}}.$$

Sa fonction de répartition est donc

$$F(x) = \int_0^x \lambda \exp(-\lambda y) dy = (1 - \exp(-\lambda x)) 1_{\{x \geq 0\}}.$$

La résolution de l'équation

$$1 - \exp(-\lambda x) = z$$

nous donne

$$x = -\frac{\log(1 - z)}{\lambda}.$$

Une simulation de cette variable aléatoire est donc donnée par

$$F^{-1}(U) = -\frac{\log(U)}{\lambda}$$

puisque les variables aléatoires U et $1 - U$ ont même loi.

En pratique F^{-1} n'a pas forcément une expression analytique simple. On peut éventuellement utiliser une méthode numérique comme la méthode de Newton pour calculer $F^{-1}(U)$. La situation peut-être encore moins favorable si même $F(x)$ est difficile à calculer ou si la variable à simuler est multi-dimensionnelle. Il existe d'autres méthodes pour simuler ce type de loi par exemple la méthode du rejet ou la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov [22] (mais nous ne les abordons pas dans ce manuscrit). Pour simuler la loi normale, il existe une méthode particulière dite de Box-Muller qui permet de simuler un couple de variables aléatoires Gaussiennes centrées, réduites et indépendantes. Soient U_1, U_2 deux variables aléatoires indépendantes, uniformément distribuées dans $[0, 1]$, alors

$$Z_0 = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \cos(2\pi U_2)$$

et

$$Z_1 = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \sin(2\pi U_2)$$

sont des variables aléatoires indépendantes suivant la loi normale centrée réduite.

Nous traiterons également dans la section (3.3.2) la simulation de variables aléatoires discrètes dans un cas particulier.

2.3 Réduction de variance

Comme nous venons de le remarquer, l'inconvénient majeur de la méthode de Monte-Carlo est sa vitesse de convergence lente donnée par $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$. Une manière d'augmenter cette vitesse de convergence est de diminuer la valeur de σ par ce qu'on appelle la réduction de variance. On est donc amené à chercher une variable aléatoire Y telle que $\mathbb{E}(X) = \mathbb{E}(Y)$ et $\sigma_Y < \sigma_X$. Il existe différentes techniques de réduction de variance comme par exemple les variables de contrôle [65] ou l'échantillonnage préférentiel [53], que nous allons maintenant détailler.

2.3.1 Variables de contrôle

On veut calculer $\mathbb{E}(Z)$ par la méthode de Monte-Carlo. La méthode des variables de contrôle consiste à écrire

$$\mathbb{E}(Z) = \mathbb{E}(Z - Y) + \mathbb{E}(Y),$$

où $\mathbb{E}(Y)$ peut se calculer explicitement et si possible $\sigma_{Z-Y}^2 < \sigma_Z^2$. La quantité $\mathbb{E}(Z - Y)$ est ensuite évaluée par la méthode de Monte Carlo. Par exemple, supposons qu'on souhaite calculer numériquement la quantité

$$I = \mathbb{E}(f(X)) = \int_D f(x) dx,$$

où X suit la loi uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. On dispose d'une fonction h dont on sait calculer l'intégrale sur D et telle que h soit une approximation de f . Posons maintenant $Z = f(X)$ et $Y = h(X)$, le calcul de I se fait alors par

$$I = \mathbb{E}(Z - Y) + \mathbb{E}(Y) = \int_D (f(x) - h(x))dx + \int_D h(x)dx$$

où la première intégrale est calculée par la méthode de Monte Carlo et où la valeur de la deuxième intégrale est connue exactement. Prenons l'exemple suivant pour illustrer notre propos. On veut calculer l'intégrale

$$I = \int_0^1 \exp(x)dx$$

par la méthode de Monte-Carlo. La variance vaut dans ce cas

$$\sigma_Z^2 = \int_0^1 (\exp(x))^2 dx - \left(\int_0^1 \exp(x) dx \right)^2 = 0.242.$$

Si on prend $h(x) = x$, la quantité

$$J = \int_0^1 (\exp(x) - x)dx$$

doit être calculée par la méthode de Monte Carlo et sa variance vaut

$$\sigma_{Z-Y}^2 = \int_0^1 (\exp(x) - x)^2 dx - \left(\int_0^1 (\exp(x) - x) dx \right)^2 = 0.04365.$$

La variance est réduite de 0.242 à 0.04365.

Si maintenant on prend $h(x) = x + \frac{x^2}{2}$ comme approximation de f , on doit alors calculer par la méthode de Monte-Carlo l'intégrale

$$J = \int_0^1 (\exp(x) - x - \frac{x^2}{2})dx$$

dont la variance vaut cette fois-ci

$$\sigma_Z^2 = \int_0^1 (\exp(x) - x - \frac{x^2}{2})^2 dx - \left(\int_0^1 (\exp(x) - x - \frac{x^2}{2}) dx \right)^2 = 0.0037.$$

Le calcul de I se fait donc par

$$I = J + \int_0^1 (x + \frac{x^2}{2})dx = J + \frac{2}{3}.$$

On constate que la variance a été effectivement réduite puisque l'on est passé de 0.242 à 0.044 puis à 0.0037 en utilisant un développement d'ordre 2. On aurait pu la réduire encore davantage en prenant plus de termes dans l'approximation de la fonction exponentielle. Le

choix de la fonction h détermine la qualité du nouvel estimateur. L'idée de cette technique est simple mais en général il n'est pas évident de déterminer une bonne variable de contrôle Y . Un autre inconvénient qui n'apparaît pas au premier coup d'oeil est le surcoût engendré par le calcul de $\mathbb{E}(Y)$ et surtout par la simulation de variable aléatoire $Z - Y$. Dans le cas où le temps de calcul de $\mathbb{E}(Y)$ est négligeable par rapport au calcul Monte-Carlo de $\mathbb{E}(Z - Y)$, le bon critère pour comparer la performance de deux estimateurs Monte-Carlo est le produit de leur variance par leur temps de calcul [55] : plus ce produit est petit meilleur est l'estimateur. Une autre difficulté pratique peut être le calcul de $\mathbb{E}(Y)$. Nous allons développer cette technique au chapitre 4 pour la résolution d'équations aux dérivées partielles, le calcul de $\mathbb{E}(Y)$ pour notre application impliquera la résolution numérique de la même équation par la méthode des éléments finis.

2.3.2 Echantillonnage préférentiel

Supposons que nous voulons calculer

$$\mathbb{E}(f(X)) = \int_D f(x)p(x)dx$$

où $p(x)$ est la densité de X . Pour toute densité g sur D , nous avons

$$\mathbb{E}(f(X)) = \int_D f(x) \frac{p(x)}{g(x)} g(x) dx = \mathbb{E} \left(\frac{f(Y)p(Y)}{g(Y)} \right),$$

où Y admet $g(x)$ comme densité. En posant $Z = \frac{f(Y)p(Y)}{g(Y)}$, on cherche comme précédemment une densité $g(x)$ telle que $\sigma_Z^2 < \sigma_{f(X)}^2$. La variance de Z se calcule par la formule suivante

$$\sigma_Z^2 = \mathbb{E}(Z^2) - \mathbb{E}(Z)^2 = \int_D \frac{f^2(x)p^2(x)}{g(x)} dx - \mathbb{E}(f(X))^2.$$

Si $f > 0$, le choix idéal est donc

$$g(x) = \frac{f(x)p(x)}{\mathbb{E}(f(X))}$$

qui annule la variance du nouvel estimateur. En pratique nous ne connaissons évidemment pas la valeur de $\mathbb{E}(f(X))$. Par contre ceci nous donne une idée pour choisir la fonction g optimale pour que la variance soit la plus petite possible. Il faut choisir la fonction $g(x)$ la plus proche possible de $|fp|$ normalisé.

Nous allons donner un exemple d'utilisation de cette technique où la variance est réduite de l'infini à une valeur finie. Nous voulons calculer $\mathbb{E}(f(X)) = \int_0^1 \frac{\exp(x)}{2\sqrt{x}} dx$, avec $f(x) = \frac{\exp(x)}{2\sqrt{x}}$ et $p(x)$ est la densité de la loi uniforme X sur $[0, 1]$. Nous avons

$$\sigma_{f(X)}^2 = \int_0^1 \frac{\exp(2x)}{4x} dx - \int_0^1 \left(\frac{\exp(x)}{2\sqrt{x}} \right)^2 dx.$$

Comme nous avons

$$\int_0^1 \frac{\exp(2x)}{4x} dx > \int_0^1 \frac{dx}{4x} = \infty$$

et

$$\left| \int_0^1 \frac{\exp(x)}{2\sqrt{x}} dx \right| < \left| \int_0^1 \frac{e}{2\sqrt{x}} dx \right| < e,$$

on en déduit que $\sigma_{f(X)}^2 = \infty$. Maintenant nous choisissons $g(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}}$ et $Z = \exp(Y)$ où $\frac{1}{2\sqrt{y}}$ est la densité de Y . La variance du nouvel estimateur est donnée par

$$\sigma_Z^2 = \int_0^1 \frac{\exp(2x)}{2\sqrt{x}} dx - \left(\int_0^1 \frac{\exp(x)}{2\sqrt{x}} dx \right)^2 < \infty.$$

La variance est donc réduite de ∞ à une valeur finie. Pour simuler Y on calcule

$$F(x) = \int_0^x \frac{1}{2\sqrt{y}} dy = \sqrt{x}$$

et on en déduit que la variable aléatoire U^2 où U est la loi uniforme sur $[0, 1]$ a même loi que Y . On peut donc proposer l'estimateur $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \exp(U_i^2)$ pour approcher $\mathbb{E}(f(X))$. On voit que cette méthode permet de faire plus de tirages dans les zones intéressantes. Ici par exemple la densité de la variable aléatoire U^2 est beaucoup plus grande autour de 0 que celle de la variable aléatoire U . Dans le chapitre 4, nous allons utiliser cette technique pour un problème d'optimisation stochastique grâce à la méthode dite d'estimation de distribution [54]. La loi de la variable aléatoire servant au tirage d'importance sera modifiée à chaque étape.

2.4 Méthode de Monte Carlo pour l'équation de Poisson avec des conditions de Dirichlet

Le mouvement Brownien peut être vu comme une description mathématique du mouvement aléatoire d'une grosse particule immergée dans un fluide et soumise à aucune autre interaction que des chocs avec les petites molécules du fluide environnant. Il en résulte un mouvement très irrégulier de la grosse particule.

D'un point de vue mathématique, il existe plusieurs façons de définir un mouvement Brownien [10], nous utilisons la définition classique tirée de [49]. On commence par rappeler la définition d'un processus aléatoire puis celle du mouvement Brownien réel.

Définition 1. Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé, (E, ε) un espace mesurable et $\mathbb{T}$ un ensemble d'indices (par exemple $\mathbb{N}, \mathbb{R}$). Un processus aléatoire ou stochastique est une application mesurable

$$X : \begin{cases} (\mathbb{T} \times \Omega, \mathcal{B}(\mathbb{T}) \otimes \mathcal{F}) \rightarrow (E, \varepsilon) \\ (t, \omega) \mapsto X_t(\omega). \end{cases}$$

Définition 2. Un mouvement Brownien réel est un processus stochastique $(W_t)_{t \in \mathbb{R}^+} \in \mathbb{R}$ tel que

1. $W_0 = 0$ presque sûrement
2. Les trajectoires $t \mapsto W_t$ sont continues, avec une probabilité 1

3. $\forall n, \forall t_i, 0 \leq t_0 \leq t_1 \dots \leq t_n$, les variables aléatoires

$$(W_{t_n} - W_{t_{n-1}}, \dots, W_{t_1} - W_{t_0}, W_{t_0})$$

sont indépendantes

4. Pour tout $0 \leq s < t$, la variable aléatoire $(W_t - W_s)$ a une distribution Gaussienne $\mathcal{N}(0, t - s)$ de moyenne 0 et de variance $t - s$.

On peut également définir un mouvement Brownien en dimension d comme un processus $(W_t^1, \dots, W_t^d)$ à valeur dans $\mathbb{R}^d$ où toutes les composantes $(W_t^i)_{t \in \mathbb{R}^+}, i = 1, \dots, d$ sont des mouvements Browniens indépendants. Le mouvement Brownien vérifie des propriétés de translation et de changement d'échelle données par la proposition suivante :

Proposition 1. Si $(W_t)_{t \geq 0}$ est un mouvement Brownien multidimensionnel alors il en est de même pour les processus $(Y_t)_{t \geq 0}$ (à valeur dans $\mathbb{R}^d$) :

1. $Y_t = a^{-1}W_{a^2t}, a > 0$;
2. $Y_t = tW_{t^{-1}}, Y_0 = 0$;
3. $Y_t = W_{t+t_0} - W_{t_0}, t_0 > 0$;
4. $Y_t = W_{T-t} - W_T, t \in [0, T]$ et $T > 0$.

On définit également $W_t^x = x + W_t$ comme le mouvement Brownien issu de x . Le mouvement Brownien est souvent utilisé pour décrire les variations des marchés financiers. Dans la suite de ce manuscrit, il servira à la résolution d'équations aux dérivées partielles.

Nous allons maintenant introduire la définition du temps local en dimension un [49]. La définition du temps local d'un processus multidimensionnel peut se trouver dans [87]. Il va servir dans la section (2.8) pour décrire une représentation probabiliste de la solution dans le cas où il y a une condition de Neumann sur le bord.

Définition 3. On suppose que $(X_s)_{s \geq 0}$ est une semi-martingale, le temps local de X au point x est un processus stochastique défini par

$$L^x(t) = \int_0^t \delta(x - X_s) d\langle X \rangle_s$$

où δ désigne la masse de Dirac en zéro et $\langle X \rangle$ désigne la variation quadratique finie du processus X . On peut aussi le définir comme

$$L^x(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \int_0^t 1_{\{x-\varepsilon < X_s < x+\varepsilon\}} ds.$$

2.4.1 Formule de Feynman-Kac pour des équations de Poisson avec des conditions aux bords de type Dirichlet

La formule de Feynman-Kac est un outil très efficace pour écrire la solution ponctuelle d'équations aux dérivées partielles linéaires de transport ou de diffusion comme la moyenne

d'une fonctionnelle d'un processus stochastique. Cette solution est ensuite calculée numériquement par la méthode de Monte-Carlo. Outre l'erreur standard liée à la méthode de Monte-Carlo, un biais peut apparaître provenant de l'approximation du processus stochastique par un schéma de discrétisation. Les algorithmes développés dans la suite reposent sur la résolution d'équations de Poisson avec des conditions au bord de type Dirichlet dans un domaine $D \subset \mathbb{R}^d$ avec un bord ∂D régulier par morceaux. Nous allons cependant rappeler la formule de Feynman-Kac ainsi que sa preuve dans le cas général de l'équation de Poisson avec des conditions aux bords de type Dirichlet et également un terme d'amortissement qui nous sera également utile dans la section (3.2). On peut également obtenir des formules de Feynman-Kac pour des opérateurs plus généraux (incluant par exemple des termes de convection) ou pour des équations paraboliques [53].

Théorème 3. *On se donne $g \in L^\infty(D)$ et f une fonction bornée et régulière définie sur D . Soit u une solution $C^2(D)$ de l'équation*

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x) + \lambda u(x) = f(x), & x \in D \\ u(x) = g(x), & x \in \partial D \end{cases} \quad (2.1)$$

où λ est une constante positive. Alors $\forall x_0 \in D$, on a

$$u(x_0) = \mathbb{E} \left(g(W_{\tau_D}^{x_0}) e^{-\lambda \tau_D} + \int_0^{\tau_D} f(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dt \right). \quad (2.2)$$

où W_t est un mouvement Brownien en dimension d et τ_D est son temps de sortie défini par

$$\tau_D = \inf\{t, W_t^{x_0} \in D^c\}$$

Démonstration. On pose $\phi(t, x) = u(x)e^{-\lambda t}$. En appliquant la formule d'Itô [49] à la fonction $\phi(t, W_t^{x_0})$, nous obtenons

$$\begin{aligned} d\phi(t, W_t^{x_0}) &= -\lambda u(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dt + \nabla u(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dW_t^{x_0} + \frac{1}{2} \Delta u(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dt \\ &= \nabla u(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dW_t^{x_0} - f(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dt. \end{aligned}$$

En intégrant de 0 à τ_D les deux membres de cette équation, nous obtenons

$$g(W_{\tau_D}^{x_0}) e^{-\lambda \tau_D} - u(x_0) = \phi(\tau_D, W_{\tau_D}^{x_0}) - \phi(0, W_0) = \int_0^{\tau_D} \nabla u(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dW_t^{x_0} - \int_0^{\tau_D} f(W_t^{x_0}) e^{-\lambda t} dt.$$

En prenant maintenant l'espérance de l'équation précédente et en notant que

$$\mathbb{E} \left(\int_0^{\tau_D} \nabla u(x) e^{-\lambda t} dW_t^{x_0} \right) = 0,$$

nous obtenons le résultat. Dans le cas où λ dépend de x , nous pouvons aussi utiliser cette technique pour obtenir la représentation Feynman-Kac de la solution en appliquant la formule d'Itô à la fonction $\phi(W_t^{x_0}, Y_t) = u(W_t^{x_0}) e^{Y_t}$ avec $Y_t = -\int_0^t \lambda(W_s^{x_0}) ds$. $\square$

On s'intéresse maintenant à l'équation de Poisson avec des conditions aux limites de Dirichlet

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x) = f(x), & x \in D \\ u(x) = g(x), & x \in \partial D \end{cases} \quad (2.3)$$

qui est un cas particulier de l'équation (2.2) en prenant $\lambda = 0$. Dans ce cas, la solution en un point x_0 quelconque est donc donnée par la formule

$$u(x_0) = \mathbb{E}\left(g(W_{\tau_D}^{x_0}) + \int_0^{\tau_D} f(W_t^{x_0})dt\right). \quad (2.4)$$

Pour calculer $\mathbb{E}(g(W_{\tau_D}^{x_0}))$, on va devoir simuler la loi de la variable aléatoire $W_{\tau_D}^{x_0}$ car pour un domaine quelconque cette loi n'est pas connue exactement. La méthode la plus classique pour simuler $W_{\tau_D}^{x_0}$ est le schéma d'Euler que nous allons décrire dans la section (2.5). On décrira ensuite deux autres méthodes plus efficaces, la marche sur les sphères (dans la section (2.6)) et la marche sur les rectangles (dans la section (2.7)). Ces deux méthodes reposent sur le fait que la loi de $W_{\tau_D}^{x_0}$ est connue dans le cas d'une sphère ou d'un rectangle.

2.5 Le Schéma d'Euler

Tout d'abord, nous allons décrire le schéma d'Euler pour un processus de diffusion général dont le mouvement Brownien est un cas particulier. On se donne un processus de diffusion $(X_t)_{t \geq 0}$ dans $\mathbb{R}^d$ défini par

$$X_t = x + \int_0^t b(X_s)ds + \int_0^t \sigma(X_s)dW_s$$

où $(W_t)_{t \geq 0}$ est un mouvement Brownien dans $\mathbb{R}^d$. Pour un pas de temps Δt , le schéma d'Euler discret pour approcher un processus X en partant de x s'écrit

$$\begin{aligned} \tilde{X}_0 &= x \\ \tilde{X}_{t_{i+1}} &= \tilde{X}_{t_i} + b(\tilde{X}_{t_i})\Delta t + \sigma(\tilde{X}_{t_i})(W_{t_{i+1}} - W_{t_i}) \end{aligned}$$

où $t_i = i\Delta t$.

Talay et Tubaro [90] ont montré que dans l'espace $\mathbb{R}$ tout entier (pas de conditions au bord), l'erreur provenant de l'approximation faible d'un processus X par son schéma d'Euler discret est un $O(\Delta t)$. Dans le cas d'une condition de type Dirichlet au bord, Gobet a montré que l'erreur se comporte comme un $O(\sqrt{\Delta t})$ [37]. Cette erreur peut être réduite à un $O(\Delta t)$ sous certaines conditions de régularité sur g grâce à l'approximation dite de demi-espace [33]. Dans ce dernier cas, on utilise le schéma d'Euler continu au lieu du schéma précédent. Pour $t \in [t_i, t_{i+1})$, le schéma d'Euler continu est donné par

$$X_t = X_{t_i} + b(X_{t_i})(t - t_i) + \sigma(X_{t_i})(W_t - W_{t_i}).$$

Le processus peut-être absorbé entre l'étape i et l'étape $i + 1$ même si $X_{t_i} \in D$ et $X_{t_{i+1}} \in D$. Si nous notons $p(X_{t_i}, X_{t_{i+1}}, \Delta t) := \mathbb{P}(\forall t \in [t_i, t_{i+1}], X_t \in D)$, dans ce cas, la marche peut

s'arrêter avec une probabilité $1 - p(X_{t_i}, X_{t_{i+1}}, \Delta t)$. Cette quantité vaut $\exp(\frac{-2d_i d_{i+1}}{\sigma^2(X_{t_i})\Delta t})$ si D est un demi-espace où $d_i = d(X_{t_i}, \partial D)$ est la distance entre X_{t_i} et ∂D . La même probabilité de s'arrêter est utilisée pour un domaine quelconque.

Si on revient au calcul de l'équation de Poisson, nous devons seulement simuler un mouvement Brownien (ce qui correspond au cas $b = 0, \sigma = 1$ dans la définition de X_t). Le schéma d'Euler discret devient

$$W_0 = x, W_{t_{i+1}}^{x_0} = W_{t_i}^{x_0} + \sqrt{\Delta t} B_i$$

où les $\{B_i\}_{i \geq 0}$ sont des vecteurs Gaussiens indépendants, de matrice de covariance $\mathcal{N}(0, I_d)$ et où Δt est le pas de discrétisation ($t_i = i\Delta t$). On suppose que $W_{t_n}^{x_0}$ a été simulé et que l'on est encore en vie à cet instant. On simule ensuite $W_{t_{n+1}}^{x_0}$: si $W_{t_{n+1}}^{x_0} \in D^c$, le mouvement s'arrête, sinon il s'arrête avec la probabilité $p(W_{t_i}^{x_0}, W_{t_{i+1}}^{x_0}, \Delta t)$. Dans tous les cas où le mouvement s'arrête, le point de sortie est approché par la projection orthogonale de $W_{t_n}^{x_0}$ sur le bord. Le biais de cette approximation est un $O(\Delta t)$.

Pour calculer le terme de source $\mathbb{E}(\int_0^{\tau_D} f(W_t^{x_0}) dt)$ on utilise encore le schéma d'Euler en le couplant avec la méthode des rectangles. Son approximation standard est donc

$$\Delta t \sum_{i=1}^n f(W_{i\Delta t}^{x_0})$$

où $n\Delta t$ est le premier instant où la marche sort du domaine ou elle est tuée par l'approximation demi-espace. On a en particulier $n\Delta t \simeq \tau_D$. Le biais sur le calcul de u est encore un $O(\Delta t)$. Nous donnerons une nouvelle version de ces schémas dans le cas $\lambda \neq 0$ dans la section (3.3). Pour terminer nous montrons dans la figure 2.2 la simulation de six trajectoires d'un mouvement Brownien sur $\mathbb{R}$ issu de 0 par le schéma d'Euler avec un pas $\Delta t = 1/300$ jusqu'au temps 1.

2.6 Simulation de la marche sur les sphères et calcul de son score

Dans cette section, nous décrivons la méthode de la marche sur les sphères et le calcul de son score associé en dimension deux et en dimension trois pour des équations de Poisson sans terme d'amortissement. Cette méthode sera très largement utilisée dans toute la suite de ce manuscrit. Nous en construirons également dans la section (3.3.2) des variantes pour traiter le cas avec un terme d'amortissement.

2.6.1 La marche sur les sphères

La marche sur les sphères, introduite par E.M.Muller [77] en 1956, est un outil important pour la résolution numérique stochastique de problèmes aux limites paraboliques et surtout elliptiques. Elle a été créée principalement pour résoudre le problème de Dirichlet pour l'opérateur Laplacien. Elle a aussi été utilisée plus récemment pour résoudre des problèmes plus généraux, impliquant par exemple des opérateurs sous forme divergence ([12], [57], [72]). Pour

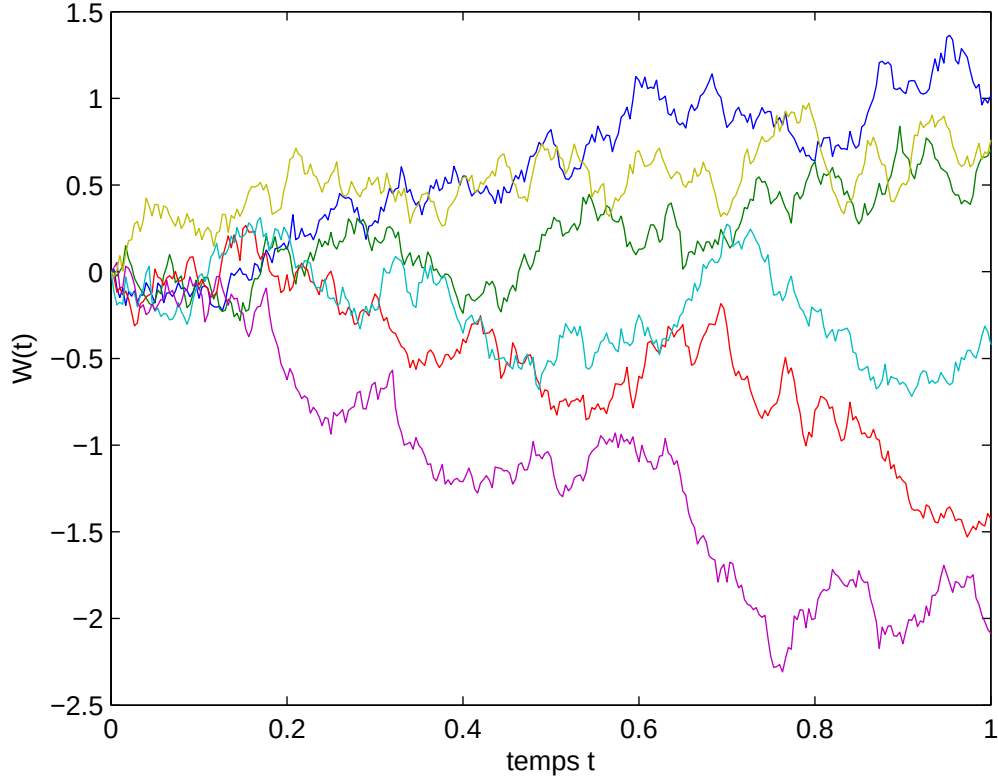


FIGURE 2.2 – Six simulations du mouvement Brownien d'origine 0 effectuées par le schéma d'Euler avec un pas $\Delta t = 1/300$

comprendre l'esprit de cette méthode, nous commençons par traiter l'équation de Laplace avec des conditions de Dirichlet

$$\Delta u = 0 \text{ dans } D, \quad u = g \text{ sur } \partial D.$$

Nous reprenons la méthodologie décrite par Muller, l'objectif étant de calculer la valeur de u en un point x_0 donné. On définit d'abord $S(x)$ comme la plus grande sphère contenue dans $\bar{D}$ centrée sur x et de rayon $\rho(x) = d(x, \partial D)$. Nous définissons ensuite un processus appelé processus sphérique $\{X_0, \dots, X_n\}$ ($x \in D$) tel que $X_0 = x_0$ de la manière suivante : en supposant connue la suite $X_0, \dots, X_n$, la variable aléatoire X_{n+1} est distribuée uniformément sur $S(X_n) = S_n$. On choisit $\varepsilon > 0$ puis on pose $N = \inf\{n : \rho(X_n) \leq \varepsilon\}$: on peut montrer que N est presque sûrement fini [75]. L'estimateur de $u(x_0)$ est $\hat{u}(x_0) = g(\bar{X}_N)$ où $\bar{X}_N$ est la projection orthogonale de X_N sur le bord. On va maintenant rappeler les propriétés de cet estimateur en terme de biais et de variance sous l'hypothèse que u est Lipschitzienne. Ceci est assuré si le bord du domaine est suffisamment régulier.

Théorème 4. *On suppose que $u(x)$ est une fonction Lipschitzienne, ce qui signifie qu'il existe une constante C qui satisfait*

$$|u(x) - u(y)| \leq C\|x - y\| \quad \forall x, y \in \bar{D}.$$

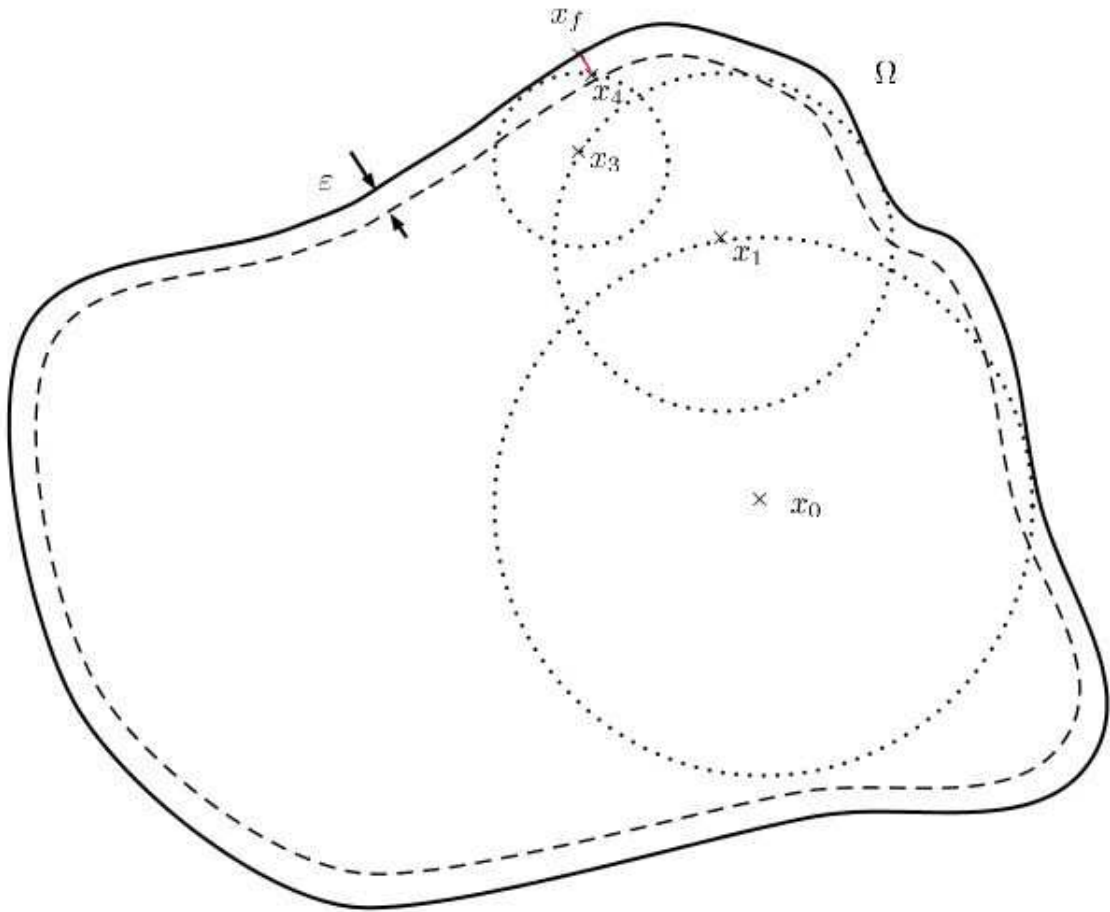


FIGURE 2.3 – Description de la marche sur les sphères

Nous obtenons les résultats suivants

1. $\mathbb{E}(\hat{u}(x_0)) = u(x_0) + O(\varepsilon)$.

2. On pose

$$M = \sup_{x \in \partial D} |g(x)| = \sup_{x \in D} |u(x)|$$

et

$$L = \sup_{x, y \in D} \|x - y\|.$$

Nous avons

$$\sigma(x)^2 = \mathbb{E}(\hat{u}(x) - u(x))^2 \leq C^2 \varepsilon^2 + 4MC\varepsilon + C^2 L^2.$$

3. Si $\hat{u}_1(x), \dots, \hat{u}_n(x)$ sont n estimateurs indépendants de $u(x)$, nous avons

$$\sigma_n(x)^2 = \mathbb{E}\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \hat{u}_i(x) - u(x)\right)^2 \leq C^2 \varepsilon^2 + \frac{1}{n}(4MC\varepsilon + C^2 L^2).$$

Le détail de la démonstration de ce théorème peut se trouver dans [75]. De plus, si D est un domaine convexe, le nombre moyen d'étapes jusqu'à l'absorption est proportionnel à $O(|\log(\varepsilon)|)$, voir [71]. Comme la variance de l'estimateur est bornée uniformément, le coût de calcul pour atteindre une erreur moyenne quadratique δ est alors donc un $O(|\log \delta| \delta^{-2})$ [24]. Cette méthode est beaucoup plus efficace que le schéma d'Euler car le nombre d'étapes jusqu'à l'absorption est beaucoup plus petit : un $O(|\log(\varepsilon)|)$ au lieu d'un $O(\frac{1}{\Delta t})$ pour le schéma d'Euler.

2.6.1.1 La fonction de Green conditionnelle

Dans de nombreux cas le terme de source dans l'équation (2.1) est non nul et le terme d'amortissement est nul. La solution au point x_0 est alors donnée par la formule (2.4). Dans ce cas là, nous devons évaluer non seulement la quantité $g(W_{\tau_D}^{x_0})$ mais aussi la quantité $\int_0^{\tau_D} f(W_t^{x_0}) dt$ le long d'une marche sur les sphères. Pour calculer la contribution à l'intégrale de chemin du terme de source, au lieu de simuler en détail le mouvement irrégulier de la trajectoire Brownienne comme avec le schéma d'Euler, nous utilisons la fonction de Green conditionnelle pour une sphère interprétée comme une densité de probabilité. La fonction de Green conditionnelle donne la distribution du mouvement Brownien à l'intérieur d'une sphère pendant son passage du centre au bord. Si on note $K(x, y)$ cette fonction de Green conditionnelle, le deuxième terme dans (2.4) pour la j ème sphère devient

$$\mathbb{E} \left[\int_0^{\tau_{S_j}} f(W_s^{x_j}) ds \mid W_{\tau_{S_j}}^{x_j} = x_{j+1} \right] = \int_{S_j} K(x_{j+1}, u) f(u) du$$

où x_{j+1} est le point de sortie de cette sphère.

Pour le cercle unité exprimé en coordonnées polaires, on suppose que le point de sortie est $x = (1, \theta_1)$, alors $K(1, \theta_1, r, \theta)$ (que l'on peut écrire simplement $K(r, \theta)$) est solution de l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2} \Delta K(r, \theta) = 0, & (r, \theta) \in S_1 \\ K(1, \theta) = \delta(\theta - \theta_1). \end{cases} \quad (2.5)$$

L'expression explicite de K en dimension 2 [43] est donnée par

$$\begin{cases} K(r, \theta) = \frac{1}{2\pi} \frac{1-r^2}{1+r^2-2r \cos(\theta-\theta_1)}, & r < 1 \\ K(1, \theta) = \delta(\theta - \theta_1). \end{cases} \quad (2.6)$$

La fonction de répartition du rayon est donc donnée par

$$F_R(r) = r^2(1 - 2 \log(r)) 1_{\{0 \leq r \leq 1\}}$$

et la fonction de répartition conditionnelle de l'angle vaut

$$F_{\theta|R=r}(\theta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{1+r}{1-r} \frac{\tan(\theta - \theta_1)}{2} \right) 1_{\{\theta_1 - \pi/2 \leq \theta \leq \theta_1 + \pi/2\}}.$$

Pour une sphère S_j de rayon r_j centrée en (x_j^1, x_j^2) , nous obtenons

$$\int_{S_j} K(x_{j+1}, u) f(u) du = \frac{r_j^2}{2} \mathbb{E}(f(P_j))$$

avec $P_j = (r_j R \cos(\theta) + x_j^1, r_j R \sin(\theta) + x_j^2)$. En dimension 3, la fonction de Green conditionnelle peut aussi se calculer explicitement [92] mais sa fonction de répartition est compliquée à calculer. Certaines techniques numériques nous permettraient peut-être de simuler cette fonction de répartition. Nous préférons utiliser une autre méthode basée sur des simulations pré-calculées que nous allons décrire dans la section suivante.

2.6.1.2 Méthode à un point aléatoire

En dimension 3, nous venons de remarquer que le calcul de la fonction de répartition de la fonction de Green conditionnelle est problématique. De plus, même si nous connaissons une formule analytique pour cette fonction de répartition, nous devons la simuler numériquement. Cela implique par exemple un certain nombre d'itérations de la méthode de Newton pour simuler la fonction de répartition du rayon. La méthode que nous allons utiliser ici consiste à créer à l'avance des réalisations d'une variable aléatoire qui seront stockées dans un fichier de grande taille. Quand nous aurons besoin d'une réalisation de cette variable aléatoire, nous tirerons au hasard uniformément dans ce fichier. Nous pouvons remplacer la formule exacte par son approximation basée sur la méthode à un point aléatoire qui a été introduite dans [63]. Cette méthode repose sur le résultat suivant : pour n'importe quel point de départ $x \in D$

$$\mathbb{E} \left(\int_0^{\tau_D} f(W_s^x) ds \right) = \mathbb{E} (\tau_D f(W_{U\tau_D}^x)),$$

où U et W_s^x sont des variables aléatoires indépendantes. Par conséquent, l'approximation faible de l'intégrale de chemin peut se réduire à évaluer le terme de source en un point aléatoire du chemin multiplié par la longueur τ_D du chemin. L'idée est de créer un couple de référence $(\tau_{S_0}, W_{U \times \tau_{S_0}}^x)$ de la trajectoire partant de l'origine, S_0 étant la sphère unité et en supposant que le point de sortie soit toujours $M(1, 0)$ en dimension deux et $M(1, 0, 0)$ en dimension trois. En pratique, nous estimons cette trajectoire par un schéma d'Euler utilisant l'approximation de demi-espace avec un pas de temps Δt très fin. Les n points de la trajectoire $W_{i\Delta t}$, $i = 0, n-1$ avant de toucher le bord sont stockés. Le point de sortie $\hat{W}_{\tau_{S_0}}$ est la projection de $W_{n\Delta t}$ sur le bord et le temps de sortie est $\tau_{S_0} = n\Delta t$. Un point $W_{i\Delta t}$ est choisi uniformément parmi les n premiers points de la trajectoire et on fait une rotation pour que le point de sortie $\hat{W}_{\tau_{S_0}}$ soit M . En dimension deux, si $\widehat{W_{n\Delta t}} = (\cos \theta, \sin \theta)$ il est transformé en $M(1, 0)$ grâce à une rotation dont la matrice est

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

En dimension trois, si $\widehat{W_{n\Delta t}} = (\cos \theta, \sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi)$, il est transformé en $M(1, 0, 0)$ grâce à une rotation dont la matrice est

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi \\ -\cos \phi \sin \theta & \sin^2 \phi + \cos^2 \phi \cos \theta & -\sin \phi \cos \phi (1 - \cos \theta) \\ -\sin \phi \sin \theta & -\sin \phi \cos \phi (1 - \cos \theta) & \cos^2 \phi + \sin^2 \phi \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Nous stockons dans un grand fichier N réalisations du couple $(\tau_{S(1)}, W_{U\tau_{S(1)}})$ obtenues en utilisant cette méthode. Ainsi, il nous suffira de tirer uniformément au hasard dans ce fichier

pour simuler de manière économique le couple précédent. Grâce à un argument d'échelle, nous obtenons également

$$\mathbb{E}\left(\int_0^{\tau_{S(x,r)}} f(\sqrt{a}(x + W_s))ds/x + rW_{\tau_{S(1)}} = z\right) = \mathbb{E}\left(\frac{r^2}{a}\tau_{S(1)}f(x + rW_{U\tau_{S(1)}})/x + W_{\tau_{S(1)}} = z\right)$$

et l'approximation

$$\mathbb{E}\left(\int_0^{\tau_{S(x,r)}} f(\sqrt{a}(x + W_s))ds/x + rW_{\tau_{S(1)}} = z\right) \simeq \frac{r^2}{a}\tau_{S(1)}f(R_z(x + rW_{U\tau_{S(1)}}))$$

où R_z est la rotation qui transforme M en $\frac{z}{\|z\|}$ qui est obtenue en changeant θ en $-\theta$ dans les rotations définies précédemment. Ainsi nous pouvons approcher facilement la contribution du terme source pour n'importe quelle sphère de rayon r et quel que soit le coefficient de diffusion constant a dans celle-ci.

2.6.2 Marche sur les sphères décentrée

Nous décrivons maintenant le cas particulier où le domaine D est lui-même un disque ou une sphère. Dans ce cas, nous allons voir qu'il est possible de simuler directement le point de sortie en partant de n'importe quel point à l'intérieur de cette sphère. Ceci nous fournira donc un estimateur sans biais et nous permettra de réduire à une le nombre d'étapes jusqu'à l'absorption par le bord du domaine. La clé de cette technique est d'utiliser le noyau de Poisson $K(x_0, x)$ et de le considérer comme la distribution de probabilité du point de sortie [72]. On peut en effet écrire

$$\mathbb{E}(g(W_{\tau_D}^{x_0})) = \int_{\partial D} K(x_0, x)g(x)dx$$

qu'on peut réécrire en dimension deux en coordonnées polaires comme

$$\int_0^{2\pi} K(r, \alpha, R, \theta)g(\theta)d\theta.$$

On peut voir cette formule comme l'espérance de $g(Y_\alpha)$ où Y_α admet K comme densité de probabilité. Le noyau de Poisson en dimension deux vaut

$$K(r, \alpha, R, \theta) = \frac{1}{2\pi} \frac{R^2 - r^2}{R^2 + r^2 - 2rR \cos(\theta - \alpha)} = \frac{r^2 - R^2}{4\pi rR} \frac{1}{\cos(\theta - \alpha) - \frac{R^2 + r^2}{2rR}}.$$

Nous expliquons d'abord comment nous pouvons simuler la variable aléatoire Y_0 de densité $K(r, 0, R, \theta)$. Nous posons

$$\beta = \frac{r^2 - R^2}{4\pi rR}, \quad \gamma = -\frac{(R^2 + r^2)}{2rR}$$

et calculons la fonction de répartition

$$F_{r,0}(t) = \int_0^t \frac{\beta}{\gamma + \cos(\theta)} d\theta = \frac{2\beta \arctan\left(\frac{(-1+\gamma)\tan(\frac{t}{2})}{\sqrt{\gamma^2-1}}\right)}{\sqrt{\gamma^2-1}}.$$

De plus, nous avons $\frac{2\beta}{\sqrt{\gamma^2-1}} = -\frac{1}{\pi}$ et $\frac{-1+\gamma}{\sqrt{\gamma^2-1}} = -\frac{R+r}{R-r}$ ce qui permet d'écrire

$$Y_0 = F_{r,0}^{-1}(U) = 2 \arctan \left(\frac{R-r}{R+r} \tan(\pi U) \right),$$

où U est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$. Comme $K(r, \alpha, R, \theta) = K(r, 0, R, \theta - \alpha)$, la variable aléatoire $Y_\alpha = Y_0 + \alpha$ admet $K(r, \alpha, R, \theta)$ comme densité.

En dimension trois, sans perte de généralité nous supposons que le point de départ du mouvement Brownien est situé en $(r, 0, 0)$. Les coordonnées du point de sortie sont

$$\begin{cases} x^1 = & R \cos \theta \sin \phi \\ x^2 = & R \sin \theta \sin \phi \\ x^3 = & R \cos \phi \end{cases} \quad (2.7)$$

où θ suit une loi uniforme sur $[0, 2\pi]$. Le noyau de Poisson pour la variable ϕ s'écrit

$$f_{R,r}(\phi) = \frac{(R^2 - r^2)R^2 \sin \phi}{4\pi R(R^2 - 2Rr \cos \phi + r^2)^{3/2}}$$

et sa fonction de répartition vaut

$$F_{R,r}(\phi) = \frac{R^2 - r^2}{2\pi Rr} \left(\frac{R}{R-r} - \frac{R}{\sqrt{R^2 - 2Rr \cos \phi + r^2}} \right).$$

Etant donnée une variable aléatoire uniforme U indépendante de θ , la variable aléatoire

$$Y_\phi = F_{R,r}^{-1}(U) = \arccos \left(\frac{R^2 + r^2}{2\pi Rr} - \frac{1}{\pi 2Rr} \left(\frac{R^2 - r^2}{R + r - 2rU} \right)^2 \right)$$

admet $f_{R,r}(\phi)$ comme densité.

2.7 La marche sur les rectangles

Cette méthode est fondée sur le calcul de la distribution du couple (temps de sortie, point de sortie) d'un rectangle grâce à la fonction de Green dans un rectangle. Dans l'article de Deaconu et Lejay [23] on peut trouver l'algorithme pour simuler (τ_D, W_{τ_D}) en dimension 2 utilisant cette méthode. On va maintenant décrire rapidement cette méthode. On commence par choisir les dimensions $l, L \in \mathbb{R}^+$ du rectangle et $W_t^{(x_1, x_2)} = (W_t^{x_1}, W_t^{x_2})$ un mouvement Brownien en dimension 2 issu de (x_1, x_2) . Nous voulons estimer le couple $(\tau', W_{\tau'}^{(x_1, x_2)})$ avec

$$\tau' = \inf \{t > 0; W_t^{(x_1, x_2)} \notin [-L, L] \times [-l, l]\}.$$

On commence par calculer une simulation (u_1, t_1) du couple (point de sortie, temps de sortie) de $W_t^{x_1}$ dans l'intervalle $[-L, L]$. Nous calculons ensuite la probabilité que $W_t^{x_1}$ quitte $[-L, L]$ avant que $W_t^{x_2}$ ne quitte $[-l, l]$.

Si W^{x_1} quitte $[-L, L]$ avant que W^{x_2} ne quitte $[-l, l]$, nous simulons la position z_2 de W^{x_2} au temps t_1 et la simulation du couple est $(t_1, (u_1, z_2))$.

Si W^{x_2} quitte $[-l, l]$ avant que W^{x_1} ne quitte $[-L, L]$, nous devons calculer le couple (u_2, t_2) de W^{x_2} sous condition $\tau' < t_1$. Ensuite il faut simuler la position z_1 de W^{x_1} au temps t_2 . La simulation du couple est $(t_2, (z_1, u_2))$.

Les lois précédentes s'expriment souvent sous forme de séries ce qui rend leurs simulations assez compliquées. En revanche, le nombre d'étapes avant absorption peut-être encore plus petit que pour la marche sur les sphères. Ceci est particulièrement vrai si le domaine est un polygone. Nous obtenons des estimateurs sans biais du couple (τ_D, W_{τ_D}) en choisissant des rectangles dont au moins un bord coïncide avec le bord du polygone.

2.8 Traitement des conditions de Neumann

On va considérer maintenant le cas où les conditions aux bords ne sont plus uniquement de type Dirichlet mais où sur une partie γ_1 du bord on a des conditions de Dirichlet et sur une partie γ_2 du bord on a des conditions de Neumann. Cela nous conduit à l'équation suivante

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x) = 0, & x \in D \\ u(x) = g_1(x), & x \in \gamma_1 \\ \frac{\partial u(x)}{\partial n} = g_2(x), & x \in \gamma_2 \end{cases} \quad (2.8)$$

où $\partial D = \gamma_1 \cup \gamma_2$ et donc la solution donnée par la formule de Feynman-Kac [64] vaut

$$u(x) = \mathbb{E} \left(\int_0^{\tau_{\gamma_1}} g_2(Z_s^x) dL_s + g_1(Z_{\tau_{\gamma_1}}^x) \right),$$

où $(Z_t^x)_{t \geq 0}$ est un mouvement Brownien réfléchi (voir [60] pour la définition de ce mouvement) et L_t est le temps local du processus $(Z_t^x)_{t \geq 0}$ qui augmente seulement sur γ_2 . Le calcul de u est relié à la simulation d'un mouvement Brownien réfléchi sur γ_2 que nous allons simuler de deux façons : le schéma d'Euler réfléchi et l'approximation cinétique.

2.8.1 Schéma d'Euler réfléchi

On se propose ici de traiter des conditions de Neumann et le calcul de $\int_0^{\tau_{\gamma_1}} g_2(Z_s^x) dL_s$ en utilisant la simulation d'un mouvement Brownien réfléchi. Le schéma d'Euler réfléchi $\{\widetilde{W}_t^x\}_{t \geq 0}$ permet cette simulation en utilisant le schéma d'Euler standard et en modifiant sa dynamique quand on approche un bord avec une condition de Neumann. Sa description est donnée dans [13] de la façon suivante : à partir de la position $\widetilde{W}_{t_i}^x$ à l'instant t_i , on commence par définir

$$W_{t_{i+1}}^x = \widetilde{W}_{t_i}^x + \sqrt{\Delta t} B_i$$

qui correspond au schéma d'Euler standard. Ensuite si $W_{t_{i+1}}^x \in D$, on a $\widetilde{W}_{t_{i+1}}^x = W_{t_{i+1}}^x$. Dans le cas où $W_{t_{i+1}}^x \in D^c$, il y a deux possibilités. Si on est sorti par le bord γ_2 on définit $\widetilde{W}_{t_{i+1}}^x$ comme le symétrique de $W_{t_{i+1}}^x$ selon la direction normale n . Si on est sorti par le bord γ_1 , on définit $\widetilde{W}_{t_{i+1}}^x$ comme l'intersection entre γ_1 et le segment $W_{t_i} W_{t_{i+1}}$ (ce point d'intersection

nous permet aussi de décider si on est sorti par γ_1 ou γ_2).

L'approximation de $\int_0^{\tau_{\gamma_1}} g_2(W_s^x) dL_s$ est moins classique. Nous allons décrire la méthode développée dans [46]. Cette quantité est approchée par

$$\Delta t \sum_{k=0}^{\frac{\tau_{\gamma_1}}{\Delta t}-1} g_2(\pi(\widetilde{W}_{k\Delta t}^x)) K_\xi(\widetilde{W}_{k\Delta t}^x - \pi(\widetilde{W}_{k\Delta t}^x))$$

où K_ξ est un noyau Gaussien défini par

$$K_\xi(x, y) := K_\xi((x_1, \dots, x_d), (y_1, \dots, y_d)) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \xi^d} \exp\left(-\sum_{i=1}^d \frac{(x_i - y_i)^2}{\xi^2}\right)$$

et $\pi(\cdot)$ est la projection orthogonale sur le bord ∂D .

2.8.2 Approximation cinétique

Une approche très différente qui sera largement utilisée dans la suite consiste à stopper la marche sur le bord avec condition de Neumann et à définir ensuite un point de remplacement pour traiter cette condition. Typiquement on va utiliser la marche sur les sphères jusqu'à atteinte de γ_2 puis la technique de remplacement ensuite. Un premier schéma en dimension 2 introduit dans [56] se base sur une approximation cinétique de l'opérateur Laplacien par un opérateur de transport [22]. Pour simplifier la présentation de cette méthode, nous supposons que γ_2 est une partie de l'axe des ordonnées avec condition de Neumann au point (x_1, x_2) . Nous introduisons un paramètre h pour approcher l'opérateur Laplacien par un opérateur de transport, le temps de collision t_c suit une loi exponentielle de paramètre 1, le vecteur de vitesse $(v_{x_1}, v_{x_2}) = (\cos(\theta), \sin(\theta))$ avec $\theta \simeq U(\frac{-\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. On peut écrire la solution comme [64]

$$u(x_1, x_2) = \mathbb{E}(u(x_1 + hv_{x_1}t_c, x_2 + hv_{x_2}t_c)) + \frac{2g_2(x_1, x_2)}{\pi}h + O(h^3).$$

La quantité $\frac{2g_2(x_1, x_2)}{\pi}h$ est la contribution du terme $\int_0^{\tau_{\gamma_1}} g_2(W_s^x) dL_s$, son biais est un $O(h^3)$. La marche recommence en un point aléatoire $(x_1 + hv_{x_1}t_c, x_2 + hv_{x_2}t_c)$. La marche continue jusqu'à ce qu'elle soit tuée par la condition de Dirichlet sur γ_1 . Nous remarquons ici que dans le cas général, il faut choisir la loi du vecteur de vitesse adaptée à la forme du domaine.

Méthodes de Monte-Carlo pour les équations sous forme divergence

Dans la modélisation physique de nombreux phénomènes de diffusion, on suppose que le flux est proportionnel au gradient de la concentration du fluide. Dans la modélisation la plus usuelle, le milieu est homogène et le fluide est supposé incompressible. Dans ces modèles simplifiés, la concentration est donc solution de l'équation de Laplace.

Dans les situations plus réalistes, le coefficient de diffusion a n'est pas forcément constant et on doit donc traiter des équations faisant intervenir un opérateur $\nabla(a\nabla\cdot)$ dit opérateur sous forme divergence. On supposera dans la suite que le coefficient de diffusion a est constant par morceaux. Cette modélisation plus fine apparaît dans de très nombreux domaines comme la géophysique [42], la magnéto-encéphalographie [61], la tomographie par impédance électrique [39], l'astrophysique [93], la dynamique des populations [16] ou encore la dynamique moléculaire via l'équation de Poisson-Boltzmann [72].

Notre but dans ce chapitre est de proposer des méthodes de Monte-Carlo pour traiter ce type d'équations aux dérivées partielles impliquant un opérateur sous forme divergence avec ou sans terme d'amortissement. Nous traitons également tous les types de conditions aux limites : Dirichlet, Neumann ou de façon plus générale, les conditions aux limites de Robin. L'équation générale que l'on va traiter s'écrit

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla u(x)) + \lambda(x)u(x) = f(x), & x \in D \\ \alpha(x)u(x) + \beta(x)\frac{\partial u(x)}{\partial n} = g(x), & x \in \partial D \end{cases} \quad (3.1)$$

dans un domaine borné $D \subset \mathbb{R}^d$ divisé en sous-domaines dans lesquels la conductivité $a(x)$ supposée scalaire et le coefficient d'amortissement $\lambda(x)$ sont constants. Les coefficients positifs α et β qui ne sont pas simultanément nuls peuvent dépendre de x dans de nombreux cas pratiques. Par exemple dans la tomographie par impédance électrique appliquée à la détection du cancer du sein, la tumeur est modélisée par des conditions de Dirichlet, les électrodes attachées sur la peau par des coefficients de Robin et le reste de la peau par des conditions de Neumann. Nous ne traitons pas ici du problème de Neumann pur qui correspond au cas $\lambda(x) = 0$ et $\alpha(x) = 0$ pour tout $x \in D$. Ce problème très difficile dont la solution est seulement définie à une constante près a été étudié par ailleurs dans [64].

Dans la section (3.1), nous rappelons les schémas numériques existants pour traiter l'opérateur sous forme divergence avec des conditions aux limites de type de Dirichlet et sans

terme source. Dans la section (3.2), nous définissons la méthode générale que nous allons utiliser pour résoudre ces équations. Cette méthode consiste en une marche aléatoire et en le calcul de son score dont la justification repose sur le principe dit de "double randomisation". Dans la section (3.3), nous nous concentrons sur le calcul du score dans le cas d'une présence simultanée d'un terme source et d'un terme d'amortissement. Dans la section (3.4) nous développons une technique appelée différences finies stochastiques pour traiter tous les types de conditions aux limites : Neumann, Robin, transmission avec ou sans terme d'amortissement. Nous effectuons également une étude globale du biais et de la variance de l'algorithme dans le cas de l'équation de Laplace avec des conditions de Robin. Dans la dernière section, nous étudions numériquement le biais global de notre algorithme sur différents cas-tests illustrant les schémas développés dans les sections précédentes.

3.1 Equation sous forme divergence avec conditions aux limites de Dirichlet

Pour simplifier la présentation, nous supposons que le domaine D avec un bord régulier par morceaux est divisé en deux sous-domaines D_1 et D_2 séparés par une interface Γ et des conditions au bord de Dirichlet

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla u(x)) = 0, & x \in D \\ u(x) = g(x), & x \in \partial D \end{cases} \quad (3.2)$$

où $g \in L^\infty(D)$ et $a(x)$ est une fonction strictement positive constante par morceaux

$$\begin{cases} a(x) = a_1, & x \in D_1 \\ a(x) = a_2 & x \in D_2. \end{cases}$$

La solution est continue sur D , très régulière dans les sous-domaines D_1 , D_2 et le flux $n(x)a(x)\nabla u(x)$ est continu sur l'interface Γ [52]. En effet, même si le domaine est constitué de plus de deux sous-domaines, les techniques que nous allons proposer reposent uniquement sur ce qui se passe à l'interface Γ entre deux sous-domaines particuliers. L'opérateur sous forme divergence peut être remplacé par un opérateur Laplacien à l'intérieur de chaque sous-domaine soumis en plus à une condition de continuité du flux sur l'interface. Nous pouvons remplacer l'équation (3.2) par les équations

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u_1(x) = 0, & x \in D_1 \\ -\frac{1}{2}\Delta u_2(x) = 0, & x \in D_2 \\ a_1 \frac{\partial u_1}{\partial n}(x) = a_2 \frac{\partial u_2}{\partial n}(x), & x \in \Gamma \\ u_1(x) = u_2(x), & x \in \Gamma \\ u_1(x) = g(x) & x \in \partial D \\ u_2(x) = g(x) & x \in \partial D \end{cases} \quad (3.3)$$

où u_1 et u_2 sont respectivement les restrictions de u à D_1 et D_2 . Soit $(X, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x)_{x \in D}$ un processus de générateur $\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla)$ et τ_D le temps de sortie de D de ce processus. La

représentation probabiliste de la solution de l'équation (3.2) au point x_0 est

$$u(x_0) = \mathbb{E}(g(X_{\tau_D}^{x_0})).$$

Dans le cas général où nous n'avons pas une formule simple pour décrire la dynamique du processus X généré par l'opérateur $\nabla(a\nabla)$. Cependant en dimension 1, nous pouvons écrire X comme la solution d'une équation différentielle incluant le temps local du processus sur laquelle reposent certains algorithmes pour simuler un processus de diffusion avec coefficients discontinus ([28],[29],[61],[70]). Grâce à la propriété Markovienne du processus X , le problème consiste à chercher une bonne approximation du processus quand il approche des zones de discontinuités du coefficient de diffusion. Dans tous les schémas présentés ici, nous supposons que le processus a touché l'interface de discontinuité entre les deux sous-domaines et qu'il faut maintenant décider de son remplacement dans l'un ou l'autre des deux sous-domaines. Cette hypothèse n'est absolument pas restrictive car avant de toucher l'interface, on peut utiliser une simulation efficace du mouvement Brownien à l'aide d'une marche sur les sphères dans le sous-domaine considéré. Nous allons rappeler les schémas les plus classiques dans le cadre de la dimension deux, pour plus de détails on pourra consulter [57]. Il y a deux approches différentes pour construire ces schémas.

La première approche consiste en la simulation du processus lié à l'opérateur. Les schémas les plus simples sont les schémas normaux où la composante suivant la normale évolue comme en dimension un alors que la composante tangentielle reste figée. Nous décrirons le schéma fondé sur le mouvement Brownien biaisé ainsi que le schéma de Hoteit. Nous décrirons également une méthode autorisant des déplacements tangentiels fondée sur l'approximation de l'opérateur sous forme divergence par un opérateur de transport de manière similaire à celle utilisée pour les conditions de Neumann.

La deuxième approche est basée sur la formule de Feynman-Kac au sens où on s'intéresse à la solution de l'équation aux dérivées partielles pour construire les schémas. Cette approche utilise des techniques de différences finies proposées pour la première fois par Mascagni [72] que nous allons généraliser et améliorer dans la section (3.4). Nous allons maintenant rappeler certains schémas que nous venons d'évoquer.

3.1.1 Schémas normaux

Les schémas normaux sont des schémas qui font bouger le processus dans la direction normale sans modifier la direction tangentielle [59]. De cette manière, tous les schémas utilisés en dimension un peuvent être aussi utilisés en dimension quelconque. Supposons que $X = (X_1, X_2)$ est le processus en dimension deux généré par l'opérateur $\frac{1}{2}\nabla(a\nabla)$. La composante normale X_1 est un processus stochastique généré par $\frac{1}{2}\frac{d}{dx_1}(a\frac{d}{dx_1})$. Si nous supposons que l'interface est définie par $\Gamma = \{(x_1, x_2)/x_1 = 0\}$ et qu'à l'instant t le processus se trouve à la position $((X_1)_t, (X_2)_t) = (0, x_2)$, on cherche la nouvelle position à l'instant $t + \Delta t$.

3.1.1.1 Mouvement Brownien biaisé

Il est montré dans [58] que la composante normale X_1 est solution de l'équation différentielle stochastique

$$(X_1)_t = x_1 + \int_0^t \sqrt{a((X_1)_s)} dW_s + \frac{a_1 - a_2}{a_1 + a_2} L_t^0(X_1)$$

où $L_t^0(X_1)$ est le temps local associé au processus X_1 . En posant $\psi(x_1) = x_1/\sqrt{a(x_1)}$, le processus $Z = \psi(X_1)$ est donc la solution de l'équation différentielle stochastique

$$Z_t = \psi(x_1) + W_t + \frac{\sqrt{a_1} - \sqrt{a_2}}{\sqrt{a_1} + \sqrt{a_2}} L_t^0(Z).$$

Le processus Z s'appelle le mouvement Brownien biaisé. En particulier si $x_1 = 0$, nous avons $Z_t = \kappa_t |W_t|$ où κ_t et W_t sont indépendants et la loi de κ_t est donnée par

$$\mathbb{P}[\kappa_t = 1] = \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_1} + \sqrt{a_2}}.$$

Dans l'algorithme 1 la composante normale x_1 bouge suivant la dynamique exacte du processus. La trajectoire est remplacée dans D_1 à la position $\sqrt{a_1 \delta t} |\xi|$ avec une probabilité $\frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_1} + \sqrt{a_2}}$ et dans D_2 à la position $-\sqrt{a_2 \delta t} |\xi|$ avec une probabilité $\frac{\sqrt{a_2}}{\sqrt{a_1} + \sqrt{a_2}}$ où δt est le pas de temps et ξ est une loi Gaussienne centrée réduite. Chaque fois que l'interface est touchée, Δt est ajouté au temps total. Le biais est un $O(\Delta t)$.

Data : la position $(0, x_2)$ de la marche à l'instant t
Result : la position (x_1, x_2) de la marche à l'instant $t + \Delta t$
 Calculer $\alpha = \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_1} + \sqrt{a_2}}$;
 $U \leftarrow \mathcal{U}[0, 1)$;
 $\xi \leftarrow \mathcal{N}[0, 1)$;
if $U \leq \alpha$ **then**
 | $x_1 \leftarrow \sqrt{a_1 \Delta t} |\xi|$
else
 | $x_1 \leftarrow -\sqrt{a_2 \Delta t} |\xi|$
end
 Δt est ajouté au temps total, x_2 est inchangé.

Algorithme 1 : Mouvement Brownien biaisé.

3.1.1.2 Schéma de Hoteit

L'algorithme 2 a été introduit par H. Hoteit [42] et est utilisé classiquement dans le contexte de la diffusion en milieux poreux. Les arguments pour sa construction reposent sur la conservation de la masse mais en fait, il peut être considéré comme une approximation de l'algorithme 1 en remplaçant la loi normale par la loi uniforme.

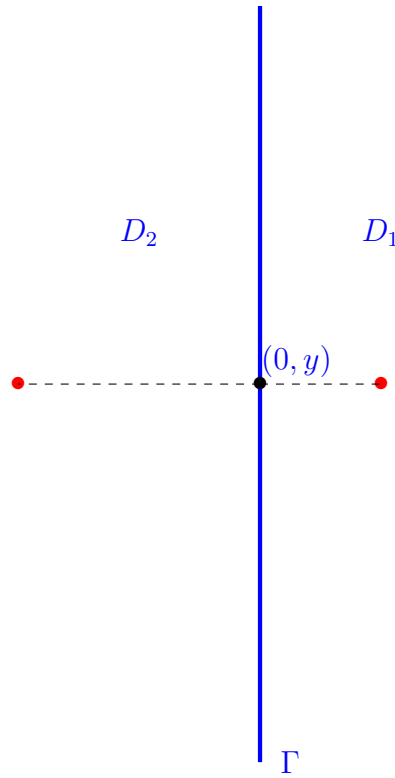


FIGURE 3.1 – Mouvement Brownien biaisé

Data : la position $(0, x_2)$ de la marche à l'instant t
Result : la position (x_1, x_2) de la marche à l'instant $t + \Delta t$
 $U \leftarrow \mathcal{U}[0, 1]$;
 $x_1 \leftarrow \sqrt{3a_2\Delta t}(U - 1) + \sqrt{3a_1\Delta t}U$;
 Δt est ajouté au temps total, x_2 est inchangé.

Algorithme 2 : Schéma de Hoteit

3.1.1.3 Différences finies stochastiques

Cette technique a été proposée la première fois dans [72]. C'est une technique simple qui prend en compte la continuité de la solution et celle du flux à l'interface. La discrétisation de la condition $a_1 \frac{\partial u_1(x)}{\partial n} = a_2 \frac{\partial u_2(x)}{\partial n}$ par différences finies conduit à la relation

$$a_1 \frac{u(h, x_2) - u(0, x_2)}{h} = a_2 \frac{u(0, x_2) - u(-h, x_2)}{h} + O(h)$$

puis à l'approximation de u au point $(0, x_2)$ par

$$u(0, x_2) = \frac{a_1}{a_1 + a_2} u(h, x_2) + \frac{a_2}{a_1 + a_2} u(-h, x_2) + O(h^2)$$

où h est le pas de différences finies. L'algorithme 3 décrit la dynamique de la marche en utilisant cette formule. Quand la marche touche l'interface, elle va dans le sous-domaine D_1

au point (h, x_2) avec une probabilité $\frac{a_1}{a_1+a_2}$ et dans le sous-domaine D_2 au point $(-h, x_2)$ avec une probabilité $\frac{a_2}{a_1+a_2}$. Contrairement au mouvement Brownien biaisé le temps n'est pas augmenté. Le biais de ce schéma est un $O(h^2)$ chaque fois qu'on touche l'interface. Dans la section (3.4), nous allons améliorer cette technique et l'étendre aux conditions de Robin. Les schémas proposés prendront plus finement en compte l'opérateur Laplacien pour obtenir un biais de l'ordre d'un $O(h^3)$

Data : la position $(0, x_2)$ de la marche à l'instant t , un paramètre h

Result : la position (x_1, x_2) de la marche à l'instant $t + \Delta t$

$U \leftarrow \mathcal{U}[0, 1);$

if $U < a_1/(a_1 + a_2)$ **then**

 | $x_1 = h$

else

 | $x_1 = -h$

end

le temps t et la composante x_2 restent inchangés

Algorithme 3 : Différences finies stochastiques.

3.1.2 Schéma cinétique

On peut également considérer des schémas pour lesquels les deux composantes du processus X_1, X_2 sont modifiées. Différentes méthodes ont été proposées dans [59] mais nous rappelons ici seulement le schéma cinétique qui est l'extension au cas des conditions de transmission du schéma utilisé précédemment pour les conditions de Neumann. L'algorithme suivant présente ce schéma en dimension deux. La nouvelle position est $(\eta \cos(\phi), x_2 + \eta \sin(\phi))$ où $\phi \in [-\pi, \pi]$ et η suit une loi exponentielle. En dimension trois, il faut juste multiplier le paramètre de la loi exponentielle par $\frac{2}{3}$ et choisir la direction uniformément sur une sphère pour l'adapter.

Data : la position $(0, x_2)$ de la marche à l'instant t , un paramètre ε

Result : la position (x_1, x_2) de la marche au temps aléatoire $t + \eta$

$\phi \leftarrow \mathcal{U}[-\pi, \pi);$

if $\phi \in (-\pi/2, \pi/2)$ **then**

 | Générer une variable aléatoire exponentielle η de paramètre $1/a_1$

else

 | Générer une variable aléatoire exponentielle η de paramètre $1/a_2$

end

$x_1 \leftarrow \varepsilon \eta \cos(\phi)$

$x_2 \leftarrow x_2 + \varepsilon \eta \sin(\phi)$

$\eta \varepsilon^2$ est ajouté au temps.

Algorithme 4 : Schéma cinétique.

3.2 Présentation générale de l'algorithme

La méthode de Monte-Carlo que nous allons développer pour résoudre des équations de la forme (3.1) est basée sur l'évolution d'une particule et de son score le long d'une marche qui se déplace d'un sous-domaine à un autre jusqu'à ce qu'elle soit tuée à cause des conditions au bord ou du terme d'amortissement. La marche est constituée de deux étapes principales : une marche dans chaque sous-domaine avec des conditions au bord de type Dirichlet et un remplacement quand le mouvement touche l'interface entre les sous-domaines ou le bord du domaine D . Le mouvement à l'intérieur des sous-domaines s'effectue à l'aide de variantes de la marche sur les sphères. Le remplacement aux interfaces entre sous-domaines ou au bord du domaine s'effectue grâce aux différences finies stochastiques décrites dans la section (3.4). La validité de l'algorithme repose sur le principe de double randomisation que nous allons commencer par décrire.

3.2.1 Double randomisation

Nous supposons que nous voulons calculer une quantité $\mathbb{E}_\sigma(\mathbb{E}_\omega(\xi(\omega, \sigma)/\sigma))$ où ξ est une variable aléatoire qui dépend de la trajectoire ω et d'un événement aléatoire σ . La simulation directe à partir de cette formule est très coûteuse car nous devons simuler N trajectoires ω pour calculer $\mathbb{E}_\omega(\phi(\omega, \sigma)/\sigma)$ pour chaque valeur de σ et ensuite calculer N fois cette espérance. La technique dite de double randomisation est décrite en détail dans le livre de Karl Sabelfeld [85]. Elle est basée sur la formule d'espérance conditionnelle suivante

$$\mathbb{E}_\sigma(\mathbb{E}_\omega(\xi(\omega, \sigma)/\sigma)) = \mathbb{E}_{(\omega, \sigma)}\xi(\omega, \sigma)$$

qui nous permet de réduire le coût de calcul car nous devons simuler seulement une trajectoire ω par valeur de σ .

Dans la résolution d'équations aux dérivées partielles, cette technique peut-être utilisée pour calculer l'intégrale sur une partie du domaine de la solution d'une équation aux dérivées partielles déterministe ou la moyenne de la solution d'une équation aux dérivées partielles stochastique. Par exemple, celle-ci intervient dans le calcul de $\int_{D_0} u(x)d\sigma(x)$ où $u(x)$ est la solution de l'équation de Laplace

$$-\frac{1}{2}\Delta u = 0, \quad u(x) = g(x) \quad x \in \partial D,$$

où $D_0 \subset D$ est une partie du domaine et σ est la loi uniforme sur D_0 . Soit maintenant X une variable aléatoire uniforme sur D_0 , nous pouvons écrire en gardant les notations précédentes

$$\int_{D_0} u(x)d\sigma(x) = \mathbb{E}_x(u(X(x)))$$

et $u(X)$ est donc un estimateur sans biais de $\int_{D_0} u(x)d\sigma(x)$. De plus, d'après la formule de Feynman-Kac pour un x fixé, nous pouvons exprimer $u(x)$ comme l'espérance d'une variable aléatoire $u(x) = \mathbb{E}_\omega(g(W_{\tau_D}^x))$ où ω est un événement aléatoire de W_{τ_D} . Nous obtenons donc

$$\mathbb{E}_x(u(X)) = \mathbb{E}_x(\mathbb{E}_\omega(g(W_{\tau_D}^x))) = \mathbb{E}_{(\omega, x)}(g(W_{\tau_D}^x)).$$

Pour calculer l'expression précédente par une méthode de Monte-Carlo, on peut donc utiliser seulement N réalisations du couple (W_{τ_D}, X) . Sans l'utilisation de cette technique, nous aurions dû utiliser N points $\{x^i\}_{i=1}^N$ choisis uniformément sur D_0 pour approcher l'intégrale $\int_{D_0} u(x) d\sigma$ et simuler N trajectoires de W_{τ_D} pour chacun des $u(x^i)$. L'approche basée sur la double randomisation est donc beaucoup plus économique.

Le calcul numérique de la formule de Feynman-Kac $u(x_0) = \mathbb{E}(g(W_{\tau_D}^{x_0}))$ par la méthode de la marche sur les sphères peut lui-même aussi être vu comme une application répétée de cette technique. La loi de X_0 est la mesure de Dirac δ_{x_0} et nous voulons calculer la quantité $u(x_0) = \mathbb{E}_{X_1}(u(X_1)/X_0 = x_0)$ où X_1 est une variable aléatoire. Puis nous fixons une réalisation x_1 de X_1 et nous devons calculer la quantité $u(x_1)$ où nous pouvons écrire encore une fois $u(x_1) = \mathbb{E}_{X_2}(u(X_2)/X_1 = x_1)$ et nous avons

$$u(x_0) = \mathbb{E}_{X_1}(u(X_1)/X_0 = x_0) = \mathbb{E}_{X_1}(\mathbb{E}_{X_2}(u(X_2)/X_1 = x_1)/X_0 = x_0).$$

X_2 est simulé et cette procédure continue jusqu'à ce qu'une valeur exacte ou approchée de u au point x_n de cette chaîne de Markov soit connue. Dans la marche sur les sphères, la loi de X_n est uniforme sur la sphère centrée sur X_{n-1} et son rayon est la distance entre X_{n-1} et le bord. La marche s'arrête quand cette distance est suffisamment petite et la valeur de $u(x_n)$ est approchée par la valeur de la solution à la projection de X_n sur le bord et nous pouvons écrire

$$u(x_0) \simeq \mathbb{E}_{(X_0, \dots, X_n)}(g(X_n)).$$

3.2.2 Application à la résolution de l'équation (3.1)

Pour résoudre l'équation (3.1) dans le domaine D , tout entier, nous devons résoudre des équations dans des sous-domaines dans lesquels le coefficient de diffusion $a(x)$ et le coefficient d'amortissement $\lambda(x)$ sont constants. Supposons que nous voulions calculer la solution en un point $x_0 \in D$ tel que $x_0 \in D_1$. En notant par a_1 et λ_1 ces deux coefficients dans un sous-domaine D_1 , la restriction u_1 de la solution u de (3.1) dans D_1 satisfait à

$$\begin{cases} -\frac{a_1}{2}\Delta u_1(x) + \lambda_1 u_1(x) = f(x), & x \in D_1 \\ u_1(x) = u(x), & x \in \partial D_1 \end{cases} \quad (3.4)$$

où $\mathbb{E}_{x_0}(\cdot) := \mathbb{E}(\cdot/W_0 = x_0)$.

La représentation probabiliste de la solution de cette équation à un point $x_0 \in D_1$ est

$$u_1(x_0) = \mathbb{E}_{x_0} \left[u(W_{\tau_{D_1}}) e^{-\frac{\lambda_1}{a_1} \tau_{D_1}} + \int_0^{\tau_{D_1}} \frac{1}{a_1} f(W_t) e^{-\frac{\lambda_1}{a_1} t} dt \right].$$

Pour mettre en oeuvre notre algorithme à l'intérieur D_1 , nous utilisons principalement la méthode de la marche sur les sphères pour résoudre des équations de Poisson décrite dans la section (2.6.1) et dans la section (3.3.2) dans le cas où $\lambda \neq 0$. Pour une sphère $S(x, r)$ de rayon r centrée en x dans D_1 , nous avons

$$u_1(x) = \mathbb{E}_x \left[u_1(W_{\tau_{S(x,r)}}) e^{-\frac{\lambda_1}{a_1} \tau_{S(x,r)}} + \int_0^{\tau_{S(x,r)}} \frac{1}{a_1} f(W_t) e^{-\frac{\lambda_1}{a_1} t} dt \right]$$

où u_1 intervient aussi dans le second membre de la représentation. Grâce aux outils de simulation décrits dans la section (3.3.2), nous aurons

$$u_1(x) = \mathbb{E}(pu_1(z) + cf(y))$$

où $0 < p \leq 1$, z est un point aléatoire sur la sphère $S(x, r)$ et y est un point aléatoire à l'intérieur de cette sphère. La quantité $cf(y)$ est ajoutée au score, le mouvement est tué avec une probabilité $1 - p$ et autrement est remplacé au point z .

La marche s'arrête dans D_1 si elle est tuée avant de toucher ∂D_1 ou si elle touche ∂D_1 en un point avec une condition de Dirichlet. Si par contre la marche touche au point y l'interface entre D_1 et D_2 ou une zone du bord de ∂D_1 avec une condition de Robin, la valeur de $u(y)$ n'est pas connue. Cependant nous allons développer dans la section (3.4) une méthode qui peut approcher cette quantité à l'aide de l'espérance d'une variable aléatoire discrète plus un biais provenant de techniques de différences finies. On va donc pouvoir de nouveau appliquer le principe de double randomisation pour calculer $u(y)$. Nous allons décrire rapidement les formules obtenues dans le cas de conditions de Robin puis de transmission.

Dans le cas de conditions de Robin, cette méthode conduit à

$$u(x) = \sum_{i=1}^N p_i u_1(x_i) + cf(y) + dg(x) + O(h^3)$$

où $N \in \mathbb{N}$ est le nombre de points de remplacement, les coefficients $p_i > 0$ vérifient $\sum_{i=1}^N p_i \leq 1$ et où h est le pas de différences finies. Les N points x_i et le point y sont localisés dans D_1 . Quand le mouvement touche le bord avec conditions de Robin, la quantité

$$cf(y) + dg(x)$$

est ajoutée au score. Le mouvement est tué avec une probabilité $1 - \sum_{i=1}^N p_i$ et autrement il est remplacé avec une probabilité p_i à l'un des points x_i .

Dans le cas de conditions de transmission entre deux sous-domaines D_1 et D_2 nous avons

$$u(x) = \sum_{i=1}^N p_i u_1(x_i^{(1)}) + \sum_{i=1}^N q_i u_2(x_i^{(2)}) + c_1 f(y_1) + c_2 f(y_2) + O(h^3)$$

où les coefficients $p_i > 0$ et $q_i > 0$ vérifient $\sum_{i=1}^N (p_i + q_i) \leq 1$ et h est le pas de différences finies. Quand l'interface est touchée par le mouvement, la quantité

$$c_1 f(y_1) + c_2 f(y_2)$$

est ajoutée au score. Les N points $x_i^{(1)}$ et y_1 sont localisés dans D_1 . Les N points $x_i^{(2)}$ et le point y_2 sont localisés dans D_2 . Le mouvement est tué avec une probabilité $1 - \sum_{i=1}^N (p_i + q_i)$ et sinon il est remplacé avec une probabilité p_i ou q_i à l'un des points $x_i^{(1)}$ ou $x_i^{(2)}$.

Si on n'est pas tué au cours du remplacement, on effectue à nouveau une marche sur les sphères à l'intérieur de D_1 ou D_2 . On continue cette alternance entre des remplacements et des marches à l'intérieur de sous-domaines jusqu'à temps que l'on soit tué.

3.3 Simulation avec un terme d'amortissement

Dans cette section, nous expliquons comment nous pouvons approcher la représentation

$$u(x) = \mathbb{E}_x \left[g(W_{\tau_D}) e^{-\lambda \tau_D} + \int_0^{\tau_D} f(W_t) e^{-\lambda t} dt \right] \quad (3.5)$$

en utilisant des schémas de simulation. Nous commençons par l'adaptation du schéma d'Euler à cette situation puis nous faisons le même travail avec la marche sur les sphères.

3.3.1 Schéma d'Euler avec amortissement

Le schéma d'Euler nous donne une approximation de

$$g(W_{\tau_D}) \exp(-\lambda \tau_D) + \int_0^{\tau_D} f(W_s) \exp(-\lambda s) ds$$

par

$$S = g(\widetilde{W}_{n\Delta t}) \exp(-\lambda n\Delta t) + \Delta t \sum_{i=0}^{n-1} f(W_{i\Delta t}) \exp(-\lambda i\Delta t)$$

où le schéma d'Euler est absorbé au point $\widetilde{W}_{n\Delta t}$ qui est la projection orthogonale de $W_{n\Delta t}$ sur le bord. Nous pouvons donner une autre interprétation du score S d'une simulation en le calculant de manière séquentielle. Etant donné $Y_0 = 0$, nous définissons

$$Y_{j+1} = \exp(-\lambda \Delta t)(Y_j + b_j)$$

avec $b_j = \Delta t f(W_{j\Delta t})$ pour $0 \leq j \leq n-1$ et avec $b_n = g(\widetilde{W}_{n\Delta t})$. Par conséquent

$$Y_{j+1} = E(X_j)(Y_j + b_j)$$

où les variables aléatoires X_j suivent des lois de Bernoulli indépendantes telles que $P(X_j = 1) = \exp(-\lambda \Delta t)$. Nous avons par construction $E(Y_{n+1}) = S$.

D'un point de vue simulation, à la j ème étape, la marche stoppe avec une probabilité $1 - \exp(-\lambda \Delta t)$ et b_j est ajoutée au score. Nous pouvons simuler Y_{n+1} seulement une fois parce que la somme S elle-même est une variable aléatoire. Ceci correspond à une approximation de Monte Carlo sur un espace produit.

3.3.2 Marche sur les sphères avec amortissement

La marche sur les sphères avec amortissement fonctionne de manière similaire à la marche sur les sphères standard. A la j ème étape de la marche, nous pouvons écrire

$$u(x_j) = \mathbb{E}_{x_j}(u(W_{\tau_{S_j}}) \exp(-\lambda \tau_{S_j}) + \int_0^{\tau_{S_j}} f(W_s) \exp(-\lambda s) ds).$$

De plus, nous avons

$$\mathbb{E}_{x_j}(u(W_{\tau_{S_j}}) \exp(-\lambda \tau_{S_j})) = \mathbb{E}_{x_j}(u(W_{\tau_{S_j}})) \mathbb{E}_{x_j}(\exp(-\lambda \tau_{S_j}))$$

car le point de sortie et le temps de sortie du mouvement Brownien d'une sphère sont indépendants. La transformée de Laplace $\mathbb{E}_{x_j}(\exp(-\lambda\tau_{S_j}))$ du temps de sortie est la probabilité de survie du mouvement Brownien qui joue le même rôle que le paramètre $\exp(-\lambda\Delta t)$ pour le schéma d'Euler. Elle dépend du rayon r_j , vaut $\frac{\sqrt{2\lambda}r_j}{\sinh(\sqrt{2\lambda}r_j)}$ en dimension trois et $\frac{1}{I_0(\sqrt{2\lambda}r_j)}$ en dimension deux où $I_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\frac{x}{2})^{2k}}{(k!)^2}$ (voir [10]). Si la marche touche le bord avant d'être tuée, l'approximation $g(\tilde{W}_{\tau_D})$ de $g(W_{\tau_D})$ est ajoutée au score. Ceci nous permet donc de traiter très facilement les équations sans terme source.

Dans le cas général, il reste à expliquer comment on peut calculer la contribution du terme source

$$\int_0^{\tau_{S_j}} f(W_s) \exp(-\lambda s) ds$$

dans la sphère S_j . On aurait envie d'utiliser une méthode analogue à celle utilisant la fonction de Green conditionnelle comme dans le cas sans terme d'amortissement. Malheureusement, nous n'avons pas réussi à mener un calcul explicite. Nous allons donc remplacer ce calcul par une méthode de simulation utilisant des trajectoires Browniennes pré-simulées à l'aide d'un schéma d'Euler. Pour la sphère unité S_1 , l'approximation du terme source à l'aide de la méthode des rectangles aux points $W_{i\Delta t}$ du schéma d'Euler s'écrit

$$\Delta t \sum_{i=0}^{n-1} f(W_{i\Delta t}) \exp(-\lambda i\Delta t) = \Delta t \frac{1 - \exp(-n\lambda\Delta t)}{1 - \exp(-\lambda\Delta t)} \sum_{i=1}^{n-1} f(W_{i\Delta t}) \exp(-\lambda i\Delta t) \frac{1 - \exp(-\lambda\Delta t)}{1 - \exp(-n\lambda\Delta t)}.$$

Si on définit maintenant une variable aléatoire discrète $J \in [0, n-1]$ vérifiant

$$\mathbb{P}(J = i) = \exp(-\lambda i\Delta t) \frac{1 - \exp(-\lambda\Delta t)}{1 - \exp(-n\lambda\Delta t)}$$

on peut alors écrire

$$\Delta t \sum_{i=0}^{n-1} f(W_{i\Delta t}) \exp(-\lambda i\Delta t) = \Delta t \frac{1 - \exp(-n\lambda\Delta t)}{1 - \exp(-\lambda\Delta t)} \mathbb{E}(f(W_{J\Delta t})).$$

Grâce à la méthode à un point aléatoire, nous pouvons approcher le terme de source par

$$\Delta t \frac{1 - \exp(-n\lambda\Delta t)}{1 - \exp(-\lambda\Delta t)} f(W_{J\Delta t})$$

en utilisant seulement un point de la trajectoire tiré selon la loi J . Grâce à un argument d'échelle, pour une sphère de rayon r centrée au point x l'approximation du terme source s'écrit

$$\Delta t \frac{1 - \exp(-n\lambda r^2\Delta t)}{1 - \exp(-\lambda r^2\Delta t)} r^2 f(x + rW_{J_r\Delta t})$$

où $J_r \in [0, n-1]$ est une variable aléatoire discrète vérifiant

$$\mathbb{P}(J_r = i) = \exp(-\lambda r^2 i\Delta t) \frac{1 - \exp(-\lambda r^2\Delta t)}{1 - \exp(-n\lambda r^2\Delta t)}.$$

La loi de J_r n'est pas uniforme et dépend de plus du rayon de la sphère. Pour simuler J_r , nous allons calculer sa fonction de répartition discrète qui vaut

$$\mathbb{P}(J_r \leq k) = \sum_{i=1}^k \mathbb{P}(J_r = i) = \sum_{i=1}^k e^{-\lambda r^2 i \Delta t} \frac{e^{-\lambda r^2 \Delta t}}{e^{-n \lambda r^2 \Delta t}} = \frac{e^{-k \lambda r^2 \Delta t}}{e^{-n \lambda r^2 \Delta t}}$$

et en utilisant la méthode d'inversion, J_r est donc simulée par

$$J_r = 1 + \lfloor \frac{-1}{\lambda r^2 \Delta t} \ln(1 - U + U e^{-n \lambda r^2 \Delta t}) \rfloor$$

où U est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$. Donc si nous voulons utiliser cette approximation, il faut précalculer et stocker pas uniquement un point aléatoire du mouvement Brownien discrétisé jusqu'au bord de la sphère unité comme dans la section précédente, mais tous les points de la trajectoire. Pour les résultats numériques, nous allons stocker 10^4 trajectoires discrétisées avec un pas de discrétisation $\Delta t = 10^{-3}$ ce qui correspond à un fichier de taille 10 millions.

3.4 Différences finies stochastiques

Le but de cette section est de construire des approximations d'ordre trois de la solution aux points du bord ou de l'interface dans le cas de conditions aux limites de Robin et de transmission en utilisant des techniques dite de différences finies stochastiques. Cette section est très largement inspirée de l'article [67] qui est en cours de révision. Ces techniques ont déjà été utilisées en dimension deux pour les conditions de Neumann et de transmission dans des travaux récents ([57],[64]). On se propose de les généraliser à la dimension trois ainsi qu'à des situations plus complexes. Pour la condition de transmission, le calcul se fait sur un domaine D divisé en deux sous-domaines D_1 et D_2 avec une frontière commune et pour les conditions aux limites de Robin sur une partie de la frontière. Le vecteur normal à la frontière est colinéaire au premier axe de coordonnées. Plus précisément, nous supposons que ces frontières sont atteintes par le mouvement au point $(0, 0)$ en dimension 2 et au point $(0, 0, 0)$ en dimension 3. Dans le cas de conditions aux limites de Robin, l'intérieur du domaine correspond aux points x vérifiant $x^1 > 0$. Dans le cas de conditions de transmission, le sous domaine D_1 correspond aux points x vérifiant $x^1 > 0$.

3.4.1 Condition aux limites de Robin sans facteur d'amortissement

Nous considérons dans un premier temps l'équation de Poisson avec des conditions aux limites de Robin dans un domaine D de frontière ∂D

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x) = f(x) & x \in D \\ \alpha(x)u(x) + \beta(x)\frac{\partial u(x)}{\partial n} = g(x) & x \in \partial D \end{cases} \quad (3.6)$$

où α and β sont des paramètres positifs pouvant dépendre de x . En fait, comme nous considérons seulement ce qui se passe en un point fixé de la frontière, nous noterons simplement α

et β comme leur valeurs en ce point.

Les conditions de Robin ont été beaucoup moins étudiées que les autres conditions d'un point de vue probabiliste. Elles sont cependant traitées dans [30] dans le cas d'une marche sur une grille cartésienne et aussi dans [74] pour les opérateurs de diffusion généraux.

3.4.1.1 Approximation en dimension deux

Etant donné un pas de discrétisation $h > 0$, nous définissons

$$\Delta^h u(0, 0) = \frac{u(h, 0) + u(-h, 0) + u(0, h) + u(0, -h) - 4u(0, 0)}{h^2}$$

l'approximation au point $(0, 0)$ de Δu par différences finies centrées et

$$\nabla_{x^1}^h u(0, 0) = \frac{4u(h, 0) - 3u(0, 0) - u(2h, 0)}{2h}$$

l'approximation de la dérivée normale par rapport à x^1 par différences finies décentrées. L'approximation par différences finies de l'opérateur Laplacien de la fonction u au point $(h, 0)$ conduit à

$$-\frac{1}{2} \frac{u(2h, 0) + u(0, 0) + u(h, h) + u(h, -h) - 4u(h, 0)}{h^2} \simeq f(h, 0) \quad (3.7)$$

tandis que l'approximation de sa dérivée normale au point $(0, 0)$ à

$$\alpha u(0, 0) + \beta \left(-\frac{4u(h, 0) - 3u(0, 0) - u(2h, 0)}{2h} \right) \simeq g(0, 0). \quad (3.8)$$

Le choix de différences finies décentrées couplé avec l'approximation du Laplacien de u au point $(h, 0)$ nous permet d'obtenir des formules où les points de remplacement de la marche sont automatiquement à l'intérieur du domaine pour h suffisamment petit. Ce n'était pas forcément le cas en utilisant des différences finies centrées pour les conditions de Neumann (voir [64]). En multipliant l'équation (3.7) par $2\beta h^2$, l'équation (3.8) par $2h$ et en additionnant les deux équations obtenues, nous avons

$$(2\alpha h + 2\beta)u(0, 0) - \beta(u(h, h) + u(h, -h)) \simeq 2\beta h^2 f(h, 0) + 2hg(0, 0).$$

Ainsi, l'approximation de la solution au point $(0, 0)$ est donnée par

$$u(0, 0) \simeq \frac{\beta(u(h, -h) + u(h, h))}{2\alpha h + 2\beta} + \frac{h}{\alpha h + \beta} g(0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta} f(h, 0). \quad (3.9)$$

L'erreur de cette approximation est un $O(h^3)$. Toutes les approximations développées de cette façon dans la suite auront le même ordre d'approximation. Le point clé de notre approche est que nous pouvons réécrire la formule (3.9) comme la somme de l'espérance d'une variable aléatoire et d'un terme déterministe (le score local) comme

$$u(0, 0) \simeq \mathbb{E}(u(Y)) + \frac{h}{\alpha h + \beta} g(0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta} f(h, 0)$$

où Y est une variable aléatoire vérifiant

$$Y = \begin{cases} (h, -h) \text{ avec une probabilité } \frac{\beta}{2\alpha h + 2\beta} \\ (h, h) \text{ avec une probabilité } \frac{\beta}{2\alpha h + 2\beta} \\ \partial \text{ avec une probabilité } \frac{\alpha h}{\alpha h + \beta} \end{cases} \quad (3.10)$$

et où l'état ∂ appelé cimetière vérifie $u(\partial) = 0$.

Du point de vue de la simulation, à chaque fois que le processus touche le bord, la quantité

$$\frac{h}{\alpha h + \beta} g(0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta} f(h, 0)$$

est ajoutée au score, il est tué avec probabilité $\frac{\alpha h}{\alpha h + \beta}$, sinon la marche continue de manière équiprobable à l'un des deux points

$$(h, -h), (h, h).$$

Les conditions aux limites de Robin apparaissent donc comme un mélange entre les conditions aux limites de Dirichlet où la marche s'arrête quand elle touche le bord et les conditions aux limites de Neumann où elle est purement réfléchie. D'un point de vue pratique, il est possible que les points de remplacement se situent à l'extérieur du domaine D . Si cela arrive, on risque de perdre le bénéfice de notre approximation d'ordre trois. Pour remédier à cet inconvénient, une stratégie consiste à réduire le pas h itérativement d'un facteur deux jusqu'à ce que le point de remplacement soit à l'intérieur du domaine. Bien sûr cette stratégie est un peu coûteuse et on peut aussi suggérer de tout simplement arrêter le mouvement car la probabilité de sortir pendant le remplacement est faible.

3.4.1.2 Approximation en dimension trois

Pour obtenir une approximation de la solution aux points du bord, nous utilisons les mêmes techniques qu'en dimension deux. La seule différence est que nous devons maintenant utiliser deux pas différents h et γh (γ sera déterminé ultérieurement) pour construire nos approximations. On commence par poser

$$\begin{aligned} A_{x^1} &= \frac{-u(2h, 0, 0) - u(0, 0, 0) + 2u(h, 0, 0)}{2h^2}, \\ A_{x^2} &= \frac{-u(h, \gamma h, 0) - u(h, -\gamma h, 0) + 2u(h, 0, 0)}{2\gamma^2 h^2}, \\ A_{x^3} &= \frac{-u(h, 0, \gamma h) - u(h, 0, -\gamma h) + 2u(h, 0, 0)}{2\gamma^2 h^2}. \end{aligned}$$

Comme précédemment, l'approximation de l'opérateur Laplacien au point $(h, 0, 0)$ et de sa dérivée au point $(0, 0, 0)$ conduisent aux équations

$$A_{x^1} + A_{x^2} + A_{x^3} \simeq f(h, 0, 0) \quad (3.11)$$

et

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial n} \simeq \alpha u + \beta \frac{3u(0,0,0) + u(2h,0,0) - 4u(h,0,0)}{2h} = g(0,0,0). \quad (3.12)$$

En multipliant l'équation (3.11) par $2\beta h^2$, l'équation (3.12) par $2h$ et en sommant les deux équations obtenues, nous avons

$$(2\beta + 2\alpha h)u(0,0,0) + \left(\frac{4\beta}{\gamma^2} - 2\beta\right)u(h,0,0) + \beta P^{h,\gamma}u(0,0,0) \simeq 2h^2\beta f(h,0,0) + 2hg(0,0,0)$$

où

$$P^{h,\gamma}u(0,0,0) = \frac{u(h,0,-\gamma h) + u(h,0,\gamma h) + u(h,\gamma h,0) + u(h,-\gamma h,0)}{2\gamma^2}. \quad (3.13)$$

En choisissant $\gamma = \sqrt{2}$ pour éliminer le terme $u(h,0,0)$, nous obtenons

$$u(0,0,0) \simeq \frac{\beta P^{h,\sqrt{2}}u}{\alpha h + \beta} + \frac{h}{\alpha h + \beta}g(0,0,0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta}f(h,0,0). \quad (3.14)$$

Comme en dimension deux, cette expression peut se réécrire

$$u(0,0,0) \simeq \mathbb{E}(Z) + \frac{h}{\alpha h + \beta}g(0,0,0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta}f(h,0,0) \quad (3.15)$$

où la variable aléatoire Z est définie par

$$Z = \begin{cases} u(h,0,\sqrt{2}h) & \text{avec une probabilité } \frac{\beta}{4\alpha h + 4\beta} \\ u(h,0,-\sqrt{2}h) & \text{avec une probabilité } \frac{\beta}{4\alpha h + 4\beta} \\ u(h,\sqrt{2}h,0) & \text{avec une probabilité } \frac{\beta}{4\alpha h + 4\beta} \\ u(h,-\sqrt{2}h,0) & \text{avec une probabilité } \frac{\beta}{4\alpha h + 4\beta} \\ 0 & \text{avec une probabilité } \frac{\alpha h}{\alpha h + \beta}. \end{cases} \quad (3.16)$$

Le mouvement est donc tué avec une probabilité $\frac{\alpha h}{\alpha h + \beta}$ et sinon il est remplacé de manière équiprobable à l'un des quatre points

$$\{(h,0,\sqrt{2}h), (h,0,-\sqrt{2}h), (h,\sqrt{2}h,0), (h,-\sqrt{2}h,0)\}.$$

3.4.2 Etude de l'algorithme général sans terme source

Dans cette section nous voulons étudier le biais de notre algorithme dans le cas de conditions de Robin sans terme source en dimension deux. On veut calculer la solution en un point x . L'algorithme fonctionne de la manière suivante. On simule le mouvement Brownien par la marche sur les sphères jusqu'à atteindre une distance ε du bord. Ensuite on projette la marche sur le bord. On ajoute un score et on est soit tué, soit remplacé dans le domaine grâce à la formule (3.9). On continue à venir retoucher le bord et à ajouter un score jusqu'au moment où l'on est tué et placé dans le cimetière ∂ . On commence par définir

$$D^h = \{x \in D : d(x, \partial D) \leq h^3\}$$

la couche d'absorption de la marche sur les sphères dont la taille est liée au pas de différence finie h . On définit le score par

$$S(x) = \begin{cases} \frac{h}{\alpha h + \beta} g(x) & \text{si } x \in \partial D, \\ 0 & \text{si } x \notin \partial D \text{ ou } x = \partial. \end{cases} \quad (3.17)$$

On définit ensuite une première marche sur les sphères partant de x jusqu'à temps d'arrêt

$$N_0 = \inf\{n \geq 0, X_n \in D^h\}$$

et également le projeté orthogonal sur ∂D par $\bar{X}_{N_0}$.

On définit ensuite la variable aléatoire

$$X_{N_0+1} = \begin{cases} X_{N_0,h} & \text{avec une probabilité } \frac{1}{2} \\ X_{N_0,-h} & \text{avec une probabilité } \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.18)$$

où $X_{N_0,h}, X_{N_0,-h}$ représentent les deux points de remplacement possibles après la projection de X_{N_0} sur le bord puis on recommence la marche sur les sphères jusqu'au temps $N_1 = \inf\{n \geq N_0 + 1, X_n \in D^h\}$. On note $\bar{X}_{N_1}$ la projection de X_{N_1} sur ∂D et on génère

$$X_{N_1+1} = \begin{cases} X_{N_1,h} & \text{avec une probabilité } \frac{1}{2} \\ X_{N_1,-h} & \text{avec une probabilité } \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.19)$$

où $X_{N_1,h}, X_{N_1,-h}$ représentent les deux points de remplacement possibles après la projection de X_{N_1} sur le bord. Nous construisons par récurrence la marche sur les sphères partant de X_{N_i+1} jusqu'au temps

$$N_{i+1} = \inf\{n \geq N_i + 1, X_n \in D^h\}.$$

On note $\bar{X}_{N_{i+1}}$ la projection de X_{N_i} sur ∂D et on génère

$$X_{N_{i+1}+1} = \begin{cases} X_{N_{i+1},h} & \text{avec une probabilité } \frac{1}{2} \\ X_{N_{i+1},-h} & \text{avec une probabilité } \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.20)$$

On se donne $(U_n)_{n \geq 1}$ des lois uniformes sur $[0, 1]$ indépendantes entre elles et aussi indépendantes de $(X_n)_{n \geq 1}$. Les variables aléatoires $(U_n)_{n \geq 1}$ correspondent à la probabilité de meurtre quand on touche le bord. On pose ensuite

$$T = \inf\{i \geq 1 : U_{N_{i-1}+1} > \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_{i-1}})\}.$$

Donc, $\sum_{i=0}^{T-1} S(\bar{X}_{N_i})$ est un estimateur de $u(x_0)$ avec un biais que nous allons analyser dans le théorème suivant

Théorème 5. *Soit D un domaine tel que $\forall x \in \partial D$ il existe un pas h indépendant des coordonnées de x tel que le point de remplacement soit à l'intérieur du domaine. Nous supposons*

que $u(x)$ est une fonction Lipschitzienne et que les coefficients $\alpha(x)$ et $\beta(x)$ satisfont les conditions suivantes

$$\inf_{x \in \partial D} |\alpha(x)| \geq \alpha_0 > 0$$

et

$$\sup_{x \in \partial D} |\beta(x)| \leq \beta_0 < \infty$$

alors $\sum_{i=0}^{T-1} S(\bar{X}_{N_i})$ est un estimateur de $u(x_0)$ qui vérifie

$$|\mathbb{E}_{x_0} \left(\sum_{i=0}^{T-1} S(\bar{X}_{N_i}) \right) - u(x_0)| = (1 + \frac{\beta_0}{\alpha_0 h}) O(h^3) \leq O(\frac{\beta_0}{\alpha_0} h^2).$$

Démonstration. On introduit la filtration $\mathcal{F}_n = \sigma((X_j, U_j)_{1 \leq j \leq n})$. On a d'après (3.9)

$$u(\bar{X}_{N_i}) = \mathbb{E}(u(X_{N_i+1}) 1_{\{U_{N_i+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_i})\}} / \mathcal{F}_{N_i}) + S(\bar{X}_{N_i}) + O(h^3).$$

Comme $d(X_{N_i}, \bar{X}_{N_i}) \leq h^3$ et u Lipschitzienne, nous avons

$$u(\bar{X}_{N_i}) = u(X_{N_i}) + O(h^3)$$

et par la propriété de martingale de l'image par u de la marche sur les sphères nous obtenons

$$u(X_{N_i+1}) = \mathbb{E}(u(X_{N_i+1}) / \mathcal{F}_{N_i+1}).$$

Donc

$$\begin{aligned} u(X_{N_i}) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(u(X_{N_i+1}) / \mathcal{F}_{N_i+1}) 1_{\{U_{N_i+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_i})\}} / \mathcal{F}_{N_i}) + S(\bar{X}_{N_i}) + O(h^3) \\ &= \mathbb{E}(u(X_{N_i+1}) 1_{\{U_{N_i+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_i})\}} / \mathcal{F}_{N_i}) + S(\bar{X}_{N_i}) + O(h^3). \end{aligned}$$

Nous avons la deuxième égalité car $1_{\{U_{N_i+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_i})\}}$ est $\mathcal{F}_{N_i+1}$ mesurable et $\mathcal{F}_{N_i} \subset \mathcal{F}_{N_i+1}$. Comme $1_{\{T > i\}}$ est $\mathcal{F}_{N_i}$ mesurable, on en déduit

$$\begin{aligned} u(X_{N_i}) 1_{\{T > i\}} &= \mathbb{E}(u(X_{N_i+1}) 1_{\{T > i\}} 1_{\{U_{N_i+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_i})\}} / \mathcal{F}_{N_i}) + (S(\bar{X}_{N_i}) + O(h^3)) 1_{\{T > i\}} \\ &= \mathbb{E}(u(X_{N_i+1}) 1_{\{T > i+1\}} / \mathcal{F}_{N_i}) + (S(\bar{X}_{N_i}) + O(h^3)) 1_{\{T > i\}}. \end{aligned}$$

En prenant l'espérance des deux côtés de la formule précédente, nous obtenons

$$\mathbb{E}_{x_0}(u(X_{N_i}) 1_{\{T > i\}} - u(X_{N_i+1}) 1_{\{T > i+1\}}) = \mathbb{E}_{x_0}(1_{\{T > i\}} S(\bar{X}_{N_i})) + O(h^3) \mathbb{P}(T > i).$$

Ensuite nous sommons sur $i \in \mathbb{N}$. Comme

$$\sum_{i=0}^{\infty} \mathbb{E}_{x_0}(u(X_{N_i}) 1_{\{T > i\}} - u(X_{N_i+1}) 1_{\{T > i+1\}}) = \mathbb{E}_{x_0}(u(x_{N_0})) = u(x_0),$$

nous avons ensuite

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(T > i) &= \mathbb{P}(U_{N_0+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_0}), \dots, U_{N_{i-1}+1} \leq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}(\bar{X}_{N_{i-1}})) \\ &\leq \mathbb{P}(U_{N_0+1} \leq \frac{\beta_0}{\alpha_0 h + \beta_0}, \dots, U_{N_{i-1}+1} \leq \frac{\beta_0}{\alpha_0 h + \beta_0}(\bar{X}_{N_{i-1}})) \\ &= \left(\frac{\beta_0}{\alpha_0 h + \beta_0} \right)^i.\end{aligned}$$

Donc

$$\sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(T > i) \leq \frac{\alpha_0 h + \beta_0}{\beta_0}.$$

Nous obtenons finalement

$$\left| \sum_{i=0}^{\infty} \mathbb{E}_{x_0} \left(S(\bar{X}_{N_i}) \right) - u(x_0) \right| \leq \left(1 + \frac{\beta_0}{\alpha_0 h} \right) O(h^3) = O\left(\frac{\beta_0}{\alpha_0} h^2 \right).$$

□

Lemme 2. Posons $\hat{u}(x_0) = \sum_{i=0}^{\infty} S(\bar{X}_{N_i})$. Alors

$$\text{Var}(\hat{u}(x_0)) \leq O\left(\frac{1}{h^2} \right) \|S\|_{L^\infty(\bar{D})}^2.$$

Rappelons que $\|S\|_{L^\infty(\bar{D})} = \sup_{x \in \bar{D}} S(x)$.

Démonstration. Nous avons

$$\text{Var}(\hat{u}(x_0)) = \mathbb{E}(\hat{u}^2(x_0)) - (\mathbb{E}(\hat{u}(x_0)))^2 \leq \mathbb{E}(\hat{u}(x_0)^2) = \mathbb{E}\left(\sum_{i=0}^{\infty} S(\bar{X}_{N_i}) \right)^2.$$

Nous avons ensuite

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left(\sum_{i=0}^{\infty} S(\bar{X}_{N_i}) \right)^2 &= \sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{E}\left(\left(\sum_{i=0}^{\infty} S(\bar{X}_{N_i}) \right)^2 / T = k \right) \mathbb{P}(T = k) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{E}\left(\sum_{i=0}^{k-1} S(\bar{X}_{N_i}) \right)^2 \mathbb{P}(T = k) \\ &\leq \|S\|_{L^\infty(\bar{D})}^2 \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \mathbb{P}(T = k).\end{aligned}$$

Si $\alpha(x)$ et $\beta(x)$ sont des constantes, nous avons

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \mathbb{P}(T = k) &= \sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) \mathbb{P}(T = k) + \sum_{k=1}^{\infty} k \mathbb{P}(T = k) \\ &= \frac{2\beta(\alpha h + \beta)}{\alpha^2 h^2} + \frac{\alpha h + \beta}{\alpha h} \\ &= 1 + \frac{3\beta}{\alpha h} + \frac{2\beta^2}{\alpha^2 h^2}.\end{aligned}$$

Si $\alpha(x)$ et $\beta(x)$ ne sont pas constantes, avec un calcul similaire nous pouvons montrer que $\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \mathbb{P}(T = k) < \infty$. $\square$

Lemme 3. *Soit $\hat{u}^1(x_0), \dots, \hat{u}^M(x_0)$ M -estimateurs indépendants de $u(x_0)$ et de même loi que $\hat{u}(x_0)$. On suppose que α et β sont des constantes positives. Il existe un pas $h > 0$ et une constante C ne dépendant pas de h vérifiant*

$$\mathbb{E} \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) - u(x_0) \right)^2 \leq Ch^4 + \frac{C}{Mh^2}$$

Démonstration. Nous avons

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) - u(x_0) \right)^2 &= \mathbb{E} \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) - \mathbb{E} \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) \right) \right)^2 \\ &\quad + \left(\mathbb{E} \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) \right) - u(x_0) \right)^2 \\ &= \text{Var} \left(\left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) \right) \right) + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left(\mathbb{E}(\hat{u}^i(x_0) - u(x_0))^2 \right). \end{aligned}$$

Comme les $\{\hat{u}^i(x_0)\}_i$ sont indépendants et de même distribution,

$$\text{Var} \left(\left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) \right) \right) = \frac{1}{M^2} \sum_{i=1}^M \text{Var}(\hat{u}^i(x_0)) = \frac{\text{Var}(\hat{u}(x_0))}{M}.$$

D'autre part, nous avons $\mathbb{E}^2(\hat{u}(x_0) - u(x_0)) = O(h^4)$. Nous obtenons donc

$$\mathbb{E} \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \hat{u}^i(x_0) - u(x_0) \right)^2 \leq Ch^4 + \frac{C}{Mh^2}.$$

$\square$

3.4.3 Conditions de Robin avec un facteur d'amortissement

Nous considérons à présent l'équation suivante avec un terme amortissement

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x) + \lambda u(x) = f(x), & x \in D \\ \alpha u(x) + \beta \frac{\partial u(x)}{\partial n} = g(x) & x \in \partial D \end{cases} \quad (3.21)$$

où λ est une constante positive. On aurait pu traiter directement cette équation plutôt que de distinguer les cas avec ou sans amortissement. On a préféré les distinguer car l'équation sans amortissement est plus standard et que les formules avec amortissement vont introduire certaines contraintes sur le pas de discrétisation.

3.4.3.1 Approximation en dimension deux

Même en dimension deux, nous allons avoir besoin de deux pas de différences finies h et γh pour construire nos formules d'approximation au bord du domaine. L'approximation du terme source conduit à l'équation

$$\frac{-u(2h, 0) - u(0, 0) + 2u(h, 0)}{2h^2} + \frac{-u(h, \gamma h) - u(h, -\gamma h) + 2u(h, 0)}{2\gamma^2 h^2} + \lambda u(h, 0) \simeq f(h, 0) \quad (3.22)$$

tandis que celle de la dérivée normale est toujours donnée par (3.8). En multipliant l'équation (3.22) par $2\beta\gamma^2 h^2$, l'équation (3.8) par $2h\gamma^2$ et en additionnant les deux équations obtenues, nous avons

$$\begin{aligned} & 2\gamma^2(\alpha h + \beta)u(0, 0) - \beta(u(h, \gamma h) + u(h, -\gamma h)) + (2\beta + 2\beta\lambda\gamma^2 h^2 - 2\gamma^2\beta)u(h, 0) \\ & = 2\gamma^2\beta h^2 f(h, 0) + 2h\gamma^2 g(0, 0). \end{aligned}$$

Comme dans les cas précédents, pour se débarrasser du terme $u(h, 0)$, nous choisissons $\gamma = \sqrt{\frac{1}{1-\lambda h^2}}$ pour h suffisamment petit tel que $\frac{1}{1-\lambda h^2} > 0$. Ceci impose donc une contrainte sur le choix du pas en fonction de la valeur de λ . Ceci conduit à l'approximation

$$u(0, 0) \simeq \frac{\beta(u(h, \gamma h) + u(h, -\gamma h))}{2\gamma^2(\alpha h + \beta)} + \frac{h}{\alpha h + \beta}g(0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta}f(h, 0).$$

La quantité

$$\frac{h}{\alpha h + \beta}g(0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta}f(h, 0)$$

est ajoutée au score. Le mouvement est tué avec une probabilité $1 - \frac{\beta}{\gamma^2(\alpha h + \beta)}$, sinon il est remplacé de manière équiprobable à l'un des deux points

$$(h, \gamma h), (h, -\gamma h).$$

3.4.3.2 Approximation en dimension trois

Comme en dimension deux, nous utilisons le pas h pour la première coordonnée et le pas γh pour les autres. Grâce à un calcul similaire au précédent, nous obtenons l'approximation

$$u(0, 0, 0) \simeq \frac{\beta}{\alpha h + \beta}P^{h, \gamma}u \frac{h}{\alpha h + \beta}g(0, 0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta}f(h, 0, 0) \quad (3.23)$$

où $\gamma = \sqrt{\frac{2}{1-\lambda h^2}}$ pour h suffisamment petit tel que $\frac{2}{1-\lambda h^2} > 0$. La quantité

$$\frac{h}{\alpha h + \beta}g(0, 0, 0) + \frac{\beta h^2}{\alpha h + \beta}f(h, 0, 0)$$

est ajoutée au score. Le mouvement est tué avec une probabilité $1 - \frac{\beta}{\gamma^2(\alpha h + \beta)}$ sinon il continue avec la même probabilité à l'un des quatre points

$$(h, \gamma h, 0), (h, -\gamma h, 0), (h, 0, \gamma h), (h, 0, -\gamma h).$$

3.4.4 Conditions de transmission sans terme d'amortissement

3.4.4.1 Approximation en dimension deux

Nous supposons que l'interface entre les sous-domaines est $\Gamma = \{(x^1, x^2)/x^1 = 0\}$ et que les deux sous-domaines sont $D_1 = \{(x^1, x^2); x^1 \geq 0\}$ et $D_2 = \{(x^1, x^2), x^1 \leq 0\}$. Nous rappelons la méthode développée dans [57] pour construire le remplacement à l'interface. Cette méthode repose sur la relation

$$\frac{h^2}{2} \Delta^h u(h, 0) = -h \bar{\nabla}_{x^1}^h u(0, 0) - u(0, 0) + P^h u(0, 0) \quad (3.24)$$

où

$$P^h u = \frac{u(h, h) + u(h, -h)}{2}.$$

Si u vérifie (3.2), u satisfait la condition de transmission (troisième équation dans (3.3)) dont l'approximation discrète s'écrit

$$a_1 \bar{\nabla}_{x^1}^{h_1} u(0, 0) = a_2 \bar{\nabla}_{x^1}^{-h_2} u(0, 0) + O(a_2 h_2^2 + a_1 h_1^2) \quad (3.25)$$

où h_1 et h_2 sont les pas de différences finies correspondant à D_1 et à D_2 . Les deux pas peuvent être choisis de manières différentes mais ils sont toujours proportionnels de telle sorte que toutes les approximations suivantes soient encore d'ordre $O(h_1^3)$. Grâce aux deux équations (3.21) et (3.22), nous obtenons l'approximation

$$u(0, 0) \simeq p_1 P^{h_1} u + p_2 P^{-h_2} u + C_1 f(h_1, 0) + C_2 f(-h_2, 0) \quad (3.26)$$

où

$$p_1 = \frac{a_1 h_2}{a_1 h_2 + a_2 h_1}, \quad p_2 = \frac{a_2 h_1}{a_1 h_2 + a_2 h_1}$$

et

$$C_1 = \frac{h_1^2 h_2}{a_1 h_2 + a_2 h_1}, \quad C_2 = \frac{h_1 h_2^2}{a_1 h_2 + a_2 h_1}.$$

Du point de vue de la simulation, ceci signifie qu'avec une probabilité p_1 le mouvement est remplacé dans D_1 avec la même probabilité au point $(h_1, -h_1)$ ou au point (h_1, h_1) et qu'avec une probabilité p_2 dans D_2 avec la même probabilité au point $(-h_2, -h_2)$ ou au point $(-h_2, h_2)$. La quantité

$$C_1 f(h_1, 0) + C_2 f(-h_2, 0)$$

est ajoutée au score.

3.4.4.2 Approximation en dimension trois

En dimension trois, nous utilisons les même outils qu'en dimension deux en remplaçant juste $P^h u$ par $P^{h, \sqrt{2}} u$ dans la relation (3.26). Nous obtenons

$$u(0, 0, 0) \simeq p_1 P^{h_1, \sqrt{2}} u + p_2 P^{-h_2, \sqrt{2}} u + C_1 f(h_1, 0, 0) + C_2 f(-h_2, 0, 0) \quad (3.27)$$

où $P^{h,\sqrt{2}}$ est défini dans (3.13). Les probabilités d'aller dans chaque sous-domaine sont les mêmes qu'en dimension deux et il y a quatre points de remplacement dans chaque sous-domaine qui sont respectivement

$$\{(h_1, 0, \sqrt{2}h_1), (h_1, 0, -\sqrt{2}h_1), (h_1, \sqrt{2}h_1, 0), (h_1, -\sqrt{2}h_1, 0)\}$$

dans D_1 et

$$\{(-h_2, 0, \sqrt{2}h_2), (-h_2, 0, -\sqrt{2}h_2), (-h_2, \sqrt{2}h_2, 0), (-h_2, -\sqrt{2}h_2, 0)\}$$

dans D_2 . La quantité

$$C_1 f(h_1, 0, 0) + C_2 f(-h_2, 0, 0)$$

est ajoutée au score.

3.4.4.3 Choix des pas de discrétisation

Il y bien entendu une grande liberté de choix pour la relation reliant les paramètres h_1 et h_2 . Nous en décrivons seulement deux qui sont les plus naturels. Dans tous les cas, la quantité

$$C_1 f(h_1, 0, 0) + C_2 f(-h_2, 0, 0)$$

est ajoutée au score.

Premier choix : $h = a_1 h_2 = a_2 h_1$. La particule va de manière équiprobable dans chacun des deux sous-domaines. Elle va cependant plus loin dans le sous-domaine avec le coefficient de diffusion le plus grand. Cette technique est très proche du schéma cinétique qui avait été introduit dans [57].

Second choix : $h_1 = h_2 = h$. On pose

$$p_1 = \frac{a_1}{a_1 + a_2}$$

et

$$p_2 = \frac{a_2}{a_1 + a_2}.$$

Le mouvement va dans D_1 avec probabilité p_1 et dans D_2 avec probabilité p_2 . Ces probabilités sont les mêmes que celles du remplacement normal [72] mais les positions de remplacement changent.

3.4.5 Conditions de transmission avec un terme d'amortissement

Nous considérons maintenant l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla u(x)) + \lambda(x)u(x) = f(x), & x \in D \\ u(x) = g(x), & x \in \partial D \end{cases} \quad (3.28)$$

où

$$\begin{cases} a(x) = a_1, \lambda(x) = \lambda_1 & x \in D_1 \\ a(x) = a_2, \lambda(x) = \lambda_2 & x \in D_2. \end{cases}$$

3.4.5.1 Approximation en dimension deux

Comme précédemment nous calculons une approximation du terme source au point $(h_1, 0)$

$$a_1 \left(\frac{-u(2h_1, 0) - u(0, 0) + 2u(h_1, 0)}{2h_1^2} + \frac{-u(h_1, \gamma_1 h_1) - u(h_1, -\gamma_1 h_1) + 2u(h_1, 0)}{2\gamma_1^2 h_1^2} \right) \quad (3.29)$$

$$+ \lambda_1 u(h_1, 0) \simeq f(h_1, 0)$$

dans le domaine D_1 et au point $(-h_2, 0)$

$$a_2 \left(\frac{-u(-2h_2, 0) - u(0, 0) + 2u(-h_2, 0)}{2h_2^2} + \frac{-u(h_2, \gamma_2 h_2) - u(-h_2, -\gamma_2 h_2) + 2u(-h_2, 0)}{2\gamma_2^2 h_2^2} \right) \quad (3.30)$$

$$+ \lambda_2 u(-h_2, 0) \simeq f(-h_2, 0)$$

dans le domaine D_2 en utilisant deux pas de différences finies h_1 et h_2 et deux constantes γ_1 et γ_2 dont les valeurs seront définies juste après. Les propriétés de continuité de la solution et du flux à l'interface conduisent à

$$a_1 \frac{(4u(h_1, 0) - 3u(0, 0) - u(2h_1, 0))}{2h_1} \simeq -a_2 \frac{(4u(-h_2, 0) - 3u(0, 0) - u(-2h_2, 0))}{2h_2}. \quad (3.31)$$

En multipliant l'équation (3.29) par h_1 , l'équation (3.30) par h_2 , en sommant les deux équations obtenues et grâce à la relation (3.31), nous obtenons

$$\begin{aligned} & \left(\frac{a_1}{h_1} + \frac{a_2}{h_2} \right) u(0, 0) - \frac{a_1}{h_1} Q^{h_1, \gamma_1} u - \frac{a_2}{h_2} Q^{-h_2, \gamma_2} u + \left(\frac{a_1}{\gamma_1^2 h_1} - \frac{a_1}{h_1} + \lambda_1 h_1 \right) u(h_1, 0) \\ & + \left(\frac{a_2}{\gamma_2^2 h_2} - \frac{a_2}{h_2} + \lambda_2 h_2 \right) u(-h_2, 0) \\ & = h_1 f(h_1, 0) + h_2 f(-h_2, 0) \end{aligned}$$

où

$$Q^{h, \gamma} u = \frac{u(h, \gamma h) + u(h, -\gamma h)}{2\gamma^2}.$$

Pour éliminer les deux termes $u(h_1, 0)$ et $u(-h_2, 0)$, nous choisissons

$$\gamma_1 = \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\lambda_1 h_1^2}{a_1}}}, \gamma_2 = \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\lambda_2 h_2^2}{a_2}}}$$

en supposant que les quantités à l'intérieur des racines sont positives. Ceci conduit à l'approximation

$$\begin{aligned} u(0, 0) \simeq & p_1 \left(1 - \frac{\lambda_1 h_1^2}{a_1} \right) \frac{u(h_1, \gamma_1 h_1) + u(h_1, -\gamma_1 h_1)}{2} + p_2 \left(1 - \frac{\lambda_2 h_2^2}{a_2} \right) \frac{u(h_2, \gamma_2 h_2) + u(h_2, -\gamma_2 h_2)}{2} \\ & + C_1 f(h_1, 0) + C_2 f(-h_2, 0) \end{aligned}$$

où p_1, p_2, C_1, C_2 sont définis comme dans la section précédente. Comme dans le cas de transmission sans terme d'amortissement, le mouvement va dans D_1 avec une probabilité p_1 . Il y est soit remplacé avec la même probabilité au point $(h_1, -\gamma_1 h_1)$ ou au point $(h_1, \gamma_1 h_1)$, soit tué avec une probabilité $1 - \frac{\lambda_1 h_1^2}{a_1}$. De même, le mouvement va dans D_2 avec une probabilité p_2 . Il y est soit remplacé avec la même probabilité au point $(-h_2, -\gamma_2 h_2)$ ou au point $(h_2, \gamma_2 h_2)$, soit tué avec une probabilité $1 - \frac{\lambda_2 h_2^2}{a_2}$.

3.4.5.2 Approximation en dimension trois

Grâce à des calculs similaires, nous obtenons l'approximation

$$u(0, 0, 0) \simeq p_1 \left(1 - \frac{\lambda_1 h_1^2}{a_1}\right) E^{h_1, \gamma_1} u + p_2 \left(1 - \frac{\lambda_2 h_2^2}{a_2}\right) E^{-h_2, \gamma_2} u + C_1 f(h_1, 0, 0) + C_2 f(-h_2, 0, 0),$$

où

$$\gamma_1 = \sqrt{\frac{2}{1 - \frac{\lambda_1 h_1^2}{a_1}}}, \gamma_2 = \sqrt{\frac{2}{1 - \frac{\lambda_2 h_2^2}{a_2}}}$$

et

$$E^{h, \gamma} u = \frac{u(h, \gamma h, 0) + u(h, -\gamma h, 0) + u(h, 0, \gamma h) + u(h, 0, -\gamma h)}{4}.$$

Il est à noter que comme précédemment notre approche impose des contraintes sur les pas h_1 et h_2 . Une approche similaire développée dans [11] d'après une idée de Nicolas Champagnat permet en gardant un peu plus longtemps dans les calculs les valeurs exactes des dérivées normales de s'affranchir de ses contraintes tout en gardant des formules d'approximation d'ordre 3.

3.5 Résultats numériques

3.5.1 Problème de Robin sans terme d'amortissement

Notre premier cas-test est l'équation de Laplace

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x) = 0, & x \in B_1 \\ u(x) + \beta \frac{\partial u(x)}{\partial n} = g(x), & x \in \partial B_1 \end{cases}$$

où B_1 est le disque unité et

$$g(x_1, x_2) = -\beta x_1 e^{x_2} (\sin x_1 + \cos x_1) + e^{x_2} (\beta x_2 + 1) (\cos x_1 - \sin x_1).$$

La solution exacte de cette équation est $u(x_1, x_2) = (\cos x_1 - \sin x_1) e^{x_2}$. Nous allons faire une description détaillée de notre algorithme basé sur la méthode de la marche sur les sphères décentrée pour résoudre cette équation et nous allons analyser son biais. Nous ferons aussi une comparaison avec la version basée sur la méthode de la marche sur les sphères standard.

3.5.1.1 Description de l'algorithme

Nous décrivons comment nous calculons la solution $u(x_1, x_2)$ en utilisant la marche sur les sphères décentrée couplée aux techniques de différences finies stochastiques. L'algorithme 5 nous donne l'évolution du score d'une seule marche en utilisant un pas h de différences finies. Notre approximation est donnée par la moyenne des scores de différentes marches indépendantes.

```

Data : un point  $x = (x_1, x_2) \in B_1$ , Paramètres :  $h, \beta$ 
Poser  $Test \leftarrow 0$  et  $Score \leftarrow 0$ ;
while  $Test \neq 1$  do
     $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$ ,  $\alpha = \arccos(\frac{x_1}{r})$ 
    Générer une variable aléatoire uniforme  $U$  sur  $[0, 1]$ 
     $\theta \leftarrow \alpha + 2 \arctan(\frac{1-r}{1+r} \tan(\pi U))$ 
     $(x_1, x_2) \leftarrow (\cos \theta, \sin \theta)$ 
     $Score \leftarrow Score + \frac{h}{h+\beta} g(x_1, x_2)$ 
    Générer une variable aléatoire uniforme  $U_1$  sur  $[0, 1]$ 
    if  $U_1 \leq \frac{h}{h+\beta}$  then
        |  $Test \leftarrow 1$ 
    else
        Générer une variable aléatoire uniforme  $U_2$  sur  $[0, 1]$ 
         $\xi_1 \leftarrow 1 - h$ 
        if  $U_2 < 0.5$  then
            |  $\xi_2 \leftarrow h$ 
        else
            |  $\xi_2 \leftarrow -h$ 
        end
         $x_1 \leftarrow \xi_1 \cos \theta - \xi_2 \sin \theta$ 
         $x_2 \leftarrow \xi_1 \sin \theta + \xi_2 \cos \theta$ 
    end
end

```

Algorithme 5 : Conditions de ROBIN avec UWOS pour le disque unité

3.5.1.2 Analyse du biais

La marche sur les sphères décentrée est une méthode exacte pour simuler le point de sortie du mouvement Brownien dans un disque. Donc le biais de notre méthode provient uniquement de l'approximation par les différences finies stochastiques quand le mouvement touche le bord. Nous reprenons très rapidement pour ce cas particulier l'analyse du biais qui a été faite dans le théorème 5.

Chaque fois que le mouvement Brownien touche le bord, il est tué avec une probabilité $\frac{h}{h+\beta}$ et l'approximation par différences finies ajoute un biais qui est un $O(h^3)$. Pour calculer le biais global, nous devons connaître le nombre de fois H où le mouvement Brownien touche le bord.

Comme H suit une loi géométrique de paramètre $\frac{h}{h+\beta}$, nous avons

$$\mathbf{E}(H) = \sum_{k=1}^{\infty} k \left(1 - \frac{h}{h+\beta}\right)^{k-1} \frac{h}{h+\beta} = 1 + \frac{\beta}{h}.$$

Par conséquent, la moyenne du nombre de visites du bord est un $O(\frac{\beta}{h})$ et le biais global est donc un $O(\beta h^2)$. Dans la figure (3.2), nous traçons en échelle logarithmique l'erreur au point $(0.5, 0.5)$ comme une fonction de h pour trois valeurs différentes de β . Le nombre de simulations est choisi suffisamment grand pour que la variance soit négligeable et donc que l'erreur soit très proche du biais de la méthode. L'ordre de la méthode calculée par un ajustement par la méthode des moindres carrés linéaires des données aux quatre points de référence est respectivement $(1.9, 2.01, 2.08)$ pour respectivement $\beta = (0.05, 0.1, 0.2)$. Les pentes obtenues sont très proches de deux et le biais augmente quand β augmente. Ceci confirme notre estimation du biais global de la méthode qui est en $O(\beta h^2)$.

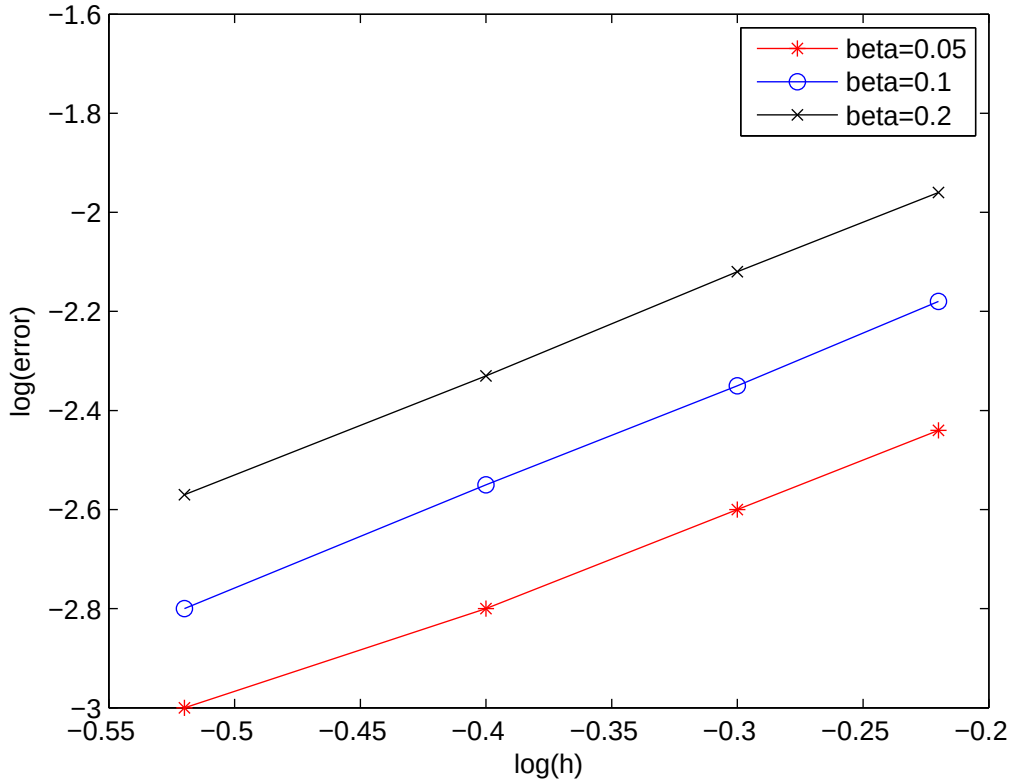


FIGURE 3.2 – Comparaisons biais versus pas h

3.5.1.3 Comparaison entre UWOS et WOS

Dans le tableau (3.1), nous comparons l'erreur et le temps de CPU de la méthode la marche sur les sphères (notée WOS) et de la marche sur les sphères décentrée (notée UWOS) pour le

calcul de la solution au point $(0.5, 0.5)$ avec $\beta = 0.1$. Le nombre de simulations est $N = 10^7$ et la taille de la couche d'absorption par la frontière vaut $\varepsilon = 10^{-6}$. L'erreur statistique donnée par $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ vaut environ 0.0004 pour les différentes valeurs de h du tableau suivant. Nous observons que les erreurs des deux méthodes sont proches et que la méthode UWOS est trois fois plus rapide que la méthode WOS. Nous pouvons en conclure que la méthode WOS est également utilisable pour notre approche mais qu'il vaut mieux utiliser la méthode UWOS quand cela est possible.

h	WOS		UWOS	
	Erreur	CPU	Erreur	CPU
0.3	0.0015	35	0.0018	10.3
0.4	0.0026	33	0.0028	9.6
0.5	0.0041	31	0.0045	9

TABLE 3.1 – Comparaison entre WOS et UWOS

3.5.2 Problème de Robin avec un terme de source

3.5.2.1 Cas test sans terme d'amortissement

Nous considérons maintenant l'équation avec un terme source

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u(x_1, x_2) = -6(x_1^2 + x_2^2), & (x_1, x_2) \in B_1 \\ u(x_1, x_2) + \beta \frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial n} = (1 + 4\beta)(x_1^4 + x_2^4), & (x_1, x_2) \in \partial B_1 \end{cases}$$

dont la solution exacte est $u(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^4$. Dans le tableau 3.2, nous comparons l'erreur et le temps CPU en utilisant soit la simulation exacte de la contribution du terme de source (2.6.1.1), soit son approximation par la méthode dite à un point aléatoire (2.6.1.2). Les paramètres sont les mêmes que dans l'exemple précédent. L'erreur statistique donnée par $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ vaut environ 0.0005 pour les différentes valeurs de h . Elle est beaucoup plus petite que l'erreur liée au biais. Nous observons que les deux méthodes donnent une précision similaire et que la méthode à un point aléatoire a un temps de calcul un peu plus petit. L'ordre de la méthode obtenu par régression linéaire vaut respectivement 2.08 pour la méthode exacte et 1.99 pour la méthode à un point aléatoire. Ceci confirme que notre méthode est encore efficace même en présence d'un terme source. De plus, ceci montre qu'il n'y a pas d'inconvénient à utiliser la méthode à un point aléatoire. Ceci sera particulièrement utile en dimension trois où la simulation exacte n'est plus possible.

h	Simulation exacte		Un point aléatoire	
	Erreur	CPU	Erreur	CPU
0.2	0.017	210	0.016	176
0.3	0.039	184	0.038	163
0.4	0.07	173	0.069	144
0.5	0.15	169	0.15	137

TABLE 3.2 – Simulation exacte versus méthode à un point aléatoire

3.5.2.2 Cas test avec un terme d'amortissement

Nous considérons maintenant l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u + \lambda u = \lambda(\cos x_1 - \sin x_1)e^{x_2}, & x \in B_1 \\ u + \beta \frac{\partial u}{\partial n} = -\beta x_1 e^{x_2}(\sin x_1 + \cos x_1) + e^{x_2}(\beta x_2 + 1)(\cos x_1 - \sin x_1), & x \in \partial B_1 \end{cases}$$

dont la solution exacte est

$$u(x_1, x_2) = (\cos x_1 - \sin x_1)e^{x_2}$$

afin de tester les méthodes développées dans la section (3.3) qui prennent en compte le terme

h	KWOS		KEuler		Euler	
	Erreur	CPU	Erreur	CPU	Erreur	CPU
0.2	0.003	288	0.012	637	0.011	725
0.3	0.0074	165	0.013	179	0.024	202
0.4	0.016	104	0.033	76	0.04	85
0.5	0.025	72	0.06	40	0.07	45
0.6	0.035	51	0.09	26	0.1	28

TABLE 3.3 – Comparaison entre KWOS, Keuler et Euler

d'amortissement. Nous calculons une solution approchée au point $(x_1, x_2) = (-0.7, -0.2)$ par trois méthodes différentes en utilisant $N = 5.10^6$ simulations, avec $\beta = 2$, $\lambda = 0.1$. Les valeurs de β et λ sont choisies pour que le nombre de visites du bord soit grand et encore proche d'un $O(\frac{1}{h})$. Cela signifie que β doit être assez grand et λ pas trop grand pour que le mouvement reste en vie assez longtemps. Les trois méthodes testées sont la méthode WOS avec taux de meurtre (KWOS), le schéma d'Euler standard et le schéma d'Euler avec taux de meurtre (KEuler). L'erreur globale de la méthode KWOS est un $O(\frac{1}{h}(\varepsilon + h^3))$ où ε est le paramètre d'absorption de la marche sur les sphères. Si nous choisissons $\varepsilon = h^3$, nous obtenons une erreur globale en $O(h^2)$. Pour les deux méthodes liées au schéma d'Euler, l'erreur globale est un $O(\frac{1}{h}(\Delta^s + h^3))$ où Δ est le paramètre du schéma d'Euler. Le paramètre s est inconnu car notre méthode combine l'approximation de demi-espace et le taux de meurtre. Néanmoins, nous choisissons $\Delta = h^3$ pour comparer avec la méthode KWOS et car s est sans doute proche de un quand le taux de meurtre est petit. L'erreur statistique donnée par $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ vaut environ 0.001 pour les différentes valeurs de h . Elle est plus petite que l'erreur liée au biais. Nous observons que la méthode KWOS est la plus efficace parmi les trois méthodes. Son ordre d'approximation est 2.3 tandis que les autres ont un ordre d'approximation proche de deux. La méthode KEuler est un peu plus efficace que le schéma d'Euler standard car son temps de calcul est plus court. Nous pouvons ajouter que les méthodes KWOS et KEuler seront d'autant plus efficaces que le paramètre λ est grand par rapport au schéma d'Euler standard car elles seront arrêtées plus rapidement.

3.5.3 Problème de transmission en dimension trois

Nous considérons l'équation suivante

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla u(x)) = 0, & x \in D \\ u(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \exp(\frac{x_1}{a_1}) \cos(x_2 + x_3), & x \in \partial D, x_1 \geq 0 \\ \exp(\frac{x_2}{a_2}) \cos(x_2 + x_3), & x \in \partial D, x_1 \leq 0 \end{cases} \end{cases}$$

dans le domaine $D = [-1, 1]^3$. Nous calculons la solution au point $(0.1, 0, 0)$ avec des coefficients de diffusion égaux à $a_1 = 1, a_2 = 0.5$. Ce point est choisi très proche de l'interface pour augmenter la moyenne du nombre de visites de cette même interface. Ceci nous permet de discriminer plus efficacement les trois méthodes différentes que nous allons comparer. La première est la méthode des différences finies stochastique avec les paramètres correspondant au deuxième choix dans la section (3.4.4.3). Avec une probabilité $\frac{1}{3}$, le mouvement va dans D_2 et avec une probabilité $\frac{2}{3}$ il va dans D_1 . Les points de remplacement sont choisis comme dans la section (3.4.4.2). Pour la deuxième méthode, les probabilités de se rendre dans chaque sous-domaine sont les mêmes mais il y a seulement deux points de remplacement choisis normalement à une distance h de part et d'autre de l'interface [72]. La troisième méthode est l'approximation cinétique qui a été introduite dans [56]. Dans cette méthode, le mouvement va avec même probabilité dans D_1 et D_2 mais il va plus loin à l'intérieur du domaine dans la zone où le coefficient de diffusion est le plus grand. Les positions de remplacement ne sont pas tirées suivant une loi discrète mais suivant une loi continue.

La solution exacte de notre équation n'est pas connue. La valeur de référence $u(0.1, 0, 0) \simeq 0.9709$ est obtenue en utilisant la première méthode avec $h = 0.01$ et un très grand nombre de simulations $N = 10^8$. Dans la figure 3.3, nous traçons en échelle logarithmique l'erreur au point $(0.1, 0, 0)$ comme une fonction du temps CPU. Nous observons que la première méthode (notée Diff2) est plus efficace que la méthode cinétique (notée Kinetic) et la méthode avec remplacement normal (notée Diff1). Nous pouvons également observer que l'ordre de la méthode est d'environ deux pour Diff2 et pour la méthode cinétique mais légèrement moins pour Diff1.

3.5.4 Equation de Poisson-Boltzmann avec une seule sphère

L'équation de Poisson-Boltzmann [72] s'écrit

$$-\nabla(a(x)\nabla u(x)) + \lambda^2(x)u(x) = \sum_{i=1}^m q_i \delta_{x_i}(x) \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (3.32)$$

où

$$\begin{cases} a(x) = a_1, \lambda(x) = 0 & x \in \Omega_{\text{int}} \\ a(x) = a_2, \lambda(x) = \bar{\lambda} & x \in \Omega_{\text{ext}}. \end{cases}$$

Les deux sous-ensembles Ω_{int} et Ω_{ext} sont des ouverts de $\mathbb{R}^3$ séparés par une interface Γ où

$$\Gamma = \partial\Omega_{\text{int}} \cap \partial\Omega_{\text{ext}}.$$

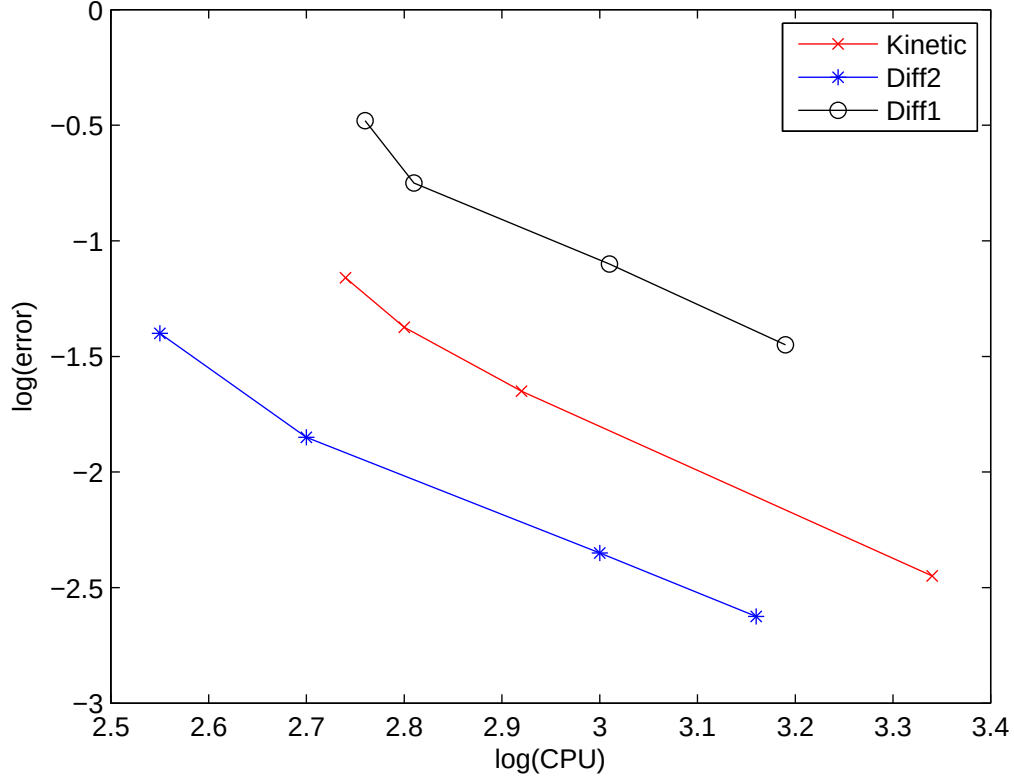


FIGURE 3.3 – Comparaison erreur versus CPU

Le sous-ensemble Ω_{int} est borné, on a $\Omega_{\text{int}} \cap \Omega_{\text{ext}} = \emptyset$ et $\bar{\Omega}_{\text{int}} \cup \bar{\Omega}_{\text{ext}} = \mathbb{R}^3$. On note δ_x la mesure de Dirac au point x , les points $x_i \in \Omega_{\text{in}}$ et les poids $q_i \in \mathbb{R}$ pour tout $i = 1, \dots, m$. Cette équation permet de calculer le potentiel électrostatique autour d'une molécule composée de m atomes centrés aux points x_i possédant une charge q_i . Le sous-domaine Ω_{int} est l'intérieur de la molécule qui est constituée d'une union de m sphères centrées sur les x_i . Ces sphères représentent les atomes de la molécule. Le sous-domaine Ω_{ext} représente l'extérieur de la molécule. La solution fondamentale de l'équation $-\Delta u = \delta$ au sens des distributions vaut

$$\frac{1}{4\pi|x|}.$$

Si on pose maintenant

$$u_0(x) = \frac{1}{4\pi a_1} \sum_{i=1}^m \frac{q_i}{|x - x_i|},$$

qui annule le terme à droite dans l'équation (3.30), nous obtenons $-a_1 \Delta(u - u_0) = 0$ dans Ω_{int} . Nous pouvons décrire très rapidement la dynamique de la marche dans ce cas là. Si la marche est dans Ω_{int} , elle est simulée exactement grâce à la marche sur les sphères décentrée jusqu'à ce qu'elle touche l'interface Γ . Si la marche est dans Ω_{ext} , elle est simulée grâce à la marche sur les sphères jusqu'à toucher l'interface Γ . Dans la j -ième sphère de rayon r_j de la

marche sur les sphères, elle peut être tuée avec une probabilité $p_1 := 1 - \frac{\sqrt{\bar{\lambda}^2/a_2 r_j}}{\sinh(\sqrt{\bar{\lambda}^2/a_2 r_j})}$. Si la marche touche l'interface, elle peut être tuée avec une faible probabilité $p_2 := \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)h^2}{a_1 + a_2}$ où

$$\gamma_1 = \sqrt{2}, \quad \gamma_2 = \frac{2}{1 - \frac{\bar{\lambda}^2 h^2}{a_2}}$$

sinon elle est remplacée à l'un des 8 points suivants avec certaines probabilités. Les points de remplacement sont définis par la fonction p :

$$p(0, 0, 0) = \begin{cases} u(h, \gamma_1 h, 0) \text{ avec une probabilité } \frac{a_1}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_1 h^2}{a_1}) \\ u(h, -\gamma_1 h, 0) \text{ avec une probabilité } \frac{a_1}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_1 h^2}{a_1}) \\ u(h, 0, \gamma_1 h) \text{ avec une probabilité } \frac{a_1}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_1 h^2}{a_1}) \\ u(h, 0, -\gamma_1 h) \text{ avec une probabilité } \frac{a_1}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_1 h^2}{a_1}) \\ u(h, \gamma_2 h, 0) \text{ avec une probabilité } \frac{a_2}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_2 h^2}{a_2}) \\ u(h, -\gamma_2 h, 0) \text{ avec une probabilité } \frac{a_2}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_2 h^2}{a_2}) \\ u(h, 0, \gamma_2 h) \text{ avec une probabilité } \frac{a_2}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_2 h^2}{a_2}) \\ u(h, 0, -\gamma_2 h) \text{ avec une probabilité } \frac{a_2}{4(a_1 + a_2)}(1 - \frac{\gamma_2 h^2}{a_2}) \end{cases} \quad (3.33)$$

Nous considérons l'équation (3.32) avec $m = 1$, $\Omega_{\text{int}} = B(0, 1)$. La charge en 0 vaut 2, $a_1 = 1$, $a_2 = 2$ et $\bar{\lambda} = 2$. La solution exacte donnée dans [12] vaut

$$u(x) = \begin{cases} -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{a_1|x| - \frac{1}{a_1}} + \frac{1}{a_2\beta} \right), & x \in \Omega_{\text{int}} \setminus \{0\} \\ \frac{\exp\left(-\frac{\bar{\lambda}}{\sqrt{a_2}}(|x| - 1)\right)}{4\pi a_2 \beta}, & x \in \Omega_{\text{ext}} \cup \Gamma \end{cases}$$

où

$$\beta = 1 + \bar{\lambda}/\sqrt{a_2}.$$

L'algorithme général est décrit dans l'algorithme 6. Nous choisissons 5 valeurs de h dans l'intervalle $[0.4, 0.8]$. Le biais est calculé en fonction de h avec 10^6 tirages de Monte-Carlo. La droite d'ajustement par moindres carrés servant à calculer l'ordre de la méthode a pour équation

$$-2.66 + 1.99 \log(h).$$

L'ordre de la méthode est donc environ deux. Dans ce cas avec une seule sphère, nous obtenons le même ordre que dans [11] pour un cas plus physique avec un ratio $\frac{a_2}{a_1}$ très grand.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé un algorithme général basé sur le principe de double randomisation pour résoudre des équations sous forme divergence avec tous types de conditions aux limites et un terme d'amortissement. Dans un premier temps, nous avons introduit des variantes du schéma d'Euler et de la marche sur les sphères pour des équations de type

```

Data : un point  $x_0 \in \Omega_{\text{int}}$ , Paramètres :  $h, \beta$ 
Poser  $k \leftarrow 0$ ,  $\text{test} = 1$  et  $\text{score} \leftarrow 0$ .
while  $\text{test} > 0$  do
  if  $x_k \in \Omega_{\text{int}}$  then
    |  $\text{exit}(x_k)$  est simulé par l'algorithme UWOS,  $\text{score} = \text{score} - u_0(\text{exit}(x_k))$ 
  else
    |  $\text{exit}(x_k)$  est simulé par l'algorithme WOS avec  $\lambda = \frac{\bar{\lambda}}{2a_2}$ .
    | Générer une variable aléatoire uniforme  $U$  sur  $[0, 1]$ .
    if  $U < p_1$  then
      |  $\text{test} = 0$ 
    else
      |  $\text{test} = 1$ 
    end
  end
  Générer une variable aléatoire uniforme  $U$  sur  $[0, 1]$ .
  if  $U < p_2$  then
    |  $\text{test} = 0$ 
  else
    |  $\text{test} = 1$ ,  $x_{k+1} = p(x_k)$ 
    if  $x_{k+1} \in \Omega_{\text{int}}$  then
      |  $\text{score} = \text{score} + u_0(x_{k+1})$ .
    end
  end
   $k \leftarrow k + 1$ 
end

```

Algorithme 6 : Equation de Poisson-Boltzmann avec une seule sphère

Poisson avec un terme d'amortissement. Le schéma d'Euler tué (KEuler) permet d'interpréter le terme d'amortissement comme une probabilité de s'arrêter à chaque pas de temps. La marche sur les sphères tuée (KWOS) repose sur le même principe et une utilisation de la méthode à un point aléatoire pour gérer le terme source. Ces deux méthodes ont montré leur efficacité par rapport au schéma d'Euler standard. Dans un deuxième temps, nous avons introduit de nouvelles techniques de différences finies pour traiter les conditions aux bords et aux interfaces entre différents milieux pour un opérateur de diffusion général dans un domaine hétérogène en dimension deux et trois. Ces techniques induisent un biais local d'ordre trois et un biais global d'ordre deux dans nos algorithmes de Monte-Carlo dans les cas des conditions de Robin, Neumann et transmission (même dans le cas plus difficile où il y a à la fois la condition de transmission et un terme d'amortissement). Nous fournissons également des résultats théoriques pour l'analyse du biais et de la variance de l'algorithme complet dans le cas de conditions de Robin. Les tests numériques ont confirmé nos estimations des biais et ont montré l'efficacité de notre nouvelle approche par rapport aux méthodes standards. Nous allons dans les chapitres suivant appliquer ces techniques à des problèmes directs et inverses en tomographie par impédance électrique pour lesquels tous les types de conditions

aux limites sont présents simultanément. Cela va impliquer un grand nombre de résolutions avec une bonne précision de problèmes directs pour lesquels les méthodes possédant un biais d'ordre élevé sont cruciales pour réduire les temps de calcul.

Problème direct en tomographie par impédance électrique

La tomographie par impédance électrique [17] est une technique pour reconstruire la structure à l'intérieur d'un conducteur électrique à partir de mesures du courant sur le bord de ce conducteur. Elle possède plusieurs applications comme par exemple la détection d'une tumeur cancéreuse dans un sein ([19],[41],[50]). Le problème inverse en tomographie par impédance électrique a été proposé la première fois par Calderón [15]. Il consiste en la reconstruction de la conductivité à partir de mesures bruitées prises sur le bord du domaine. Ce problème inverse est un problème mal-posé au sens où une petite erreur sur les mesures peut perturber énormément la solution de ce problème. Dans ce travail, nous voulons à la fois détecter des anomalies et reconstruire la distribution de conductivité sous l'hypothèse qu'elle est isotrope et constante par morceaux. Nous allons travailler avec un modèle circulaire sensé modéliser le sein qui sera constitué de deux couches. La couche de peau a une conductivité électrique plus faible que celle à l'intérieur du sein qui est constituée de gras. Ce modèle est plus général que le modèle habituel ([39], [84]) qui ne prend pas en compte la couche de peau. La simulation des mesures se fait par l'intermédiaire de différents modèles comme le modèle continu ou encore le modèle des électrodes.

Nous allons tout d'abord rappeler l'origine de l'équation sous forme divergence en tomographie par impédance électrique. Une courte description du modèle du continu et des trois modèles des électrodes est aussi rappelée. Ensuite, nous fournissons le calcul de la constante sur l'inclusion ainsi que des intensités sur chaque électrode. Nous allons analyser le biais théoriquement sur un cas simple où le domaine est un intervalle avec une condition de Robin d'un côté et de Neumann de l'autre. Nous introduisons une technique de réduction de variance fondée sur les idées développées dans [62]. Enfin, nous donnerons les résultats numériques de l'analyse de l'ordre du biais et confirmerons l'efficacité de la technique de réduction de variance en dimension deux. Nous abordons aussi le modèle des électrodes en dimension trois et testons la technique de réduction de variance dans ce cas.

4.1 Mise en équation

Dans un conducteur D , le champ électrique et le champ magnétique vérifient les équations de Maxwell

$$\text{rot}E = -\frac{\partial H}{\partial t}, \text{rot}H = \sigma E + \epsilon \frac{\partial E}{\partial t} \quad (4.1)$$

où E et H correspondent respectivement au champ électrique et au champ magnétique et où rot désigne l'opérateur rotationnel. Les quantités σ, ϵ et μ sont respectivement la conductivité électrique, la perméabilité magnétique et la perméabilité électrique. Il existe deux approches différentes pour obtenir une équation aux dérivées partielles simple à l'intérieur du conducteur [45]. Dans la première approche décrite ici, nous utilisons le modèle quasi-statique dans lequel les champs magnétiques et les champs électriques sont stationnaires à tout instant, ce qui se traduit par le fait que les variations de $\frac{\partial E}{\partial t}$ et de $\frac{\partial H}{\partial t}$ sont négligées. Dans ce cas, le système de Maxwell est donné par

$$\text{rot}E = 0, \text{rot}H = \sigma E. \quad (4.2)$$

D'après un résultat classique d'analyse vectorielle, comme $\text{rot}E = 0$, E peut s'écrire comme le gradient d'un potentiel électrique u , c'est à dire $E = \nabla u$. En remplaçant E par son expression dans l'équation (4.2) nous obtenons $\text{rot}H = \sigma \nabla u$. En prenant la divergence des deux côtés de cette équation et en remarquant que $\text{div}(\text{rot}H) = 0$, nous obtenons l'équation de diffusion

$$\nabla(\sigma \nabla u) = 0. \quad (4.3)$$

La deuxième approche généralise l'équation précédente au cas σ complexe. Dans ce travail, nous nous intéressons seulement au cas quasi-statique où la conductivité σ est réelle et positive. Nous supposons de plus qu'il existe deux constantes C_1 et C_2 telles que

$$0 < C_1 < \sigma(x) < C_2 < +\infty, \quad \forall x \in D.$$

4.2 Le problème de Calderón

Dans le modèle dit du continu, les condition aux limites sont

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial n} = j \quad (4.4)$$

où j représente la densité de l'intensité de sortie sur le bord. Par exemple, dans un milieu homogène en dimension 2, j peut-être modélisée par $\sin(k\theta)$ ou $\cos(k\theta)$ ([18],[39]). Si ∂D est suffisamment régulier, le problème aux limites (4.3) et (4.4) a une solution unique si et seulement si

$$\langle j, 1 \rangle_{\partial D} = 0$$

où $\langle . \rangle$ désigne le produit scalaire entre deux fonctions f et g :

$$\langle f, g \rangle_{\partial D} = \int_{\partial D} f(x)g(x)dx.$$

D'un point de vue physique, cette condition traduit la conservation du courant sortant. Etant donnée l'intensité j , la solution des équations (4.3) et (4.4) est unique à une constante près.

Si $j \in H_\diamond^{-1/2}(\partial D) := \{j \in H^{1/2}(\partial D) : \langle j, 1 \rangle_{\partial D} = 0\}$, il existe une classe de fonctions $u \in H^1(D)/\mathbb{R}$ unique qui satisfait la formulation variationnelle

$$\int_D \sigma \nabla u \nabla v d\sigma = \langle j, v|_{\partial D} \rangle_{\partial D}.$$

Nous pouvons définir l'opérateur Dirichlet-Neumann ou tension-courant Λ_σ comme suit

$$\begin{aligned} \Lambda_\sigma : H_\diamond^{1/2}(\partial D) &\rightarrow H_\diamond^{-1/2}(\partial D) \\ u &\mapsto \sigma \frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial D}. \end{aligned}$$

Le problème inverse de conductivité dans le modèle continu s'appelle le problème de Calderón : *Etant donné l'opérateur Λ_σ , il s'agit de déterminer la distribution de σ dans D à partir de Λ_σ .* Comme dans tous les problèmes inverses nous devons étudier la stabilité et l'identifiabilité du problème de Calderón. Nous reprenons l'analyse de la stabilité et l'identifiabilité écrite dans la thèse de Martin Simon [88]. Concernant l'identifiabilité du problème, en dimension deux, si $\sigma \in L_+^\infty(D)$ est isotrope, Astala et Paivarinta ont montré dans leur article [3] que la solution est unique.

Théorème 6. *Soit $D \subset \mathbb{R}^2$ un domaine borné, simplement connexe et $\sigma_i \in L^\infty(D)$, $i = 1, 2$. Nous supposons encore qu'il existe une constante c positive telle que $c^{-1} \leq \sigma_i \leq c$, alors si*

$$\Lambda_{\sigma_1} = \Lambda_{\sigma_2}$$

on a $\sigma_1 = \sigma_2$.

Dans le cas où σ est anisotrope, σ est défini par une matrice symétrique définie positive. Astala, Paivarinta et Lassas ont montré dans [4] qu'on peut construire un difféomorphisme F tel que $\Lambda_{F*\sigma} = \Lambda_\sigma$. Cela veut dire qu'il existe une large classe de conductivités produisant la même mesure sur le bord. Par conséquent, l'unicité du problème inverse au sens usuel n'est pas assurée. Par contre, l'unicité du problème est montrée au sens où si $\Lambda_{\sigma_1} = \Lambda_{\sigma_2}$ alors $\sigma_2 = F * \sigma_1$. Quand $d \geq 3$, sous l'hypothèse d'isotropie de σ et si $\sigma \in C^1(D)$, l'unicité de la solution est conservée. Dans le cas où σ est anisotrope, la question de l'unicité est pour l'instant toujours ouverte.

La question de stabilité se pose ainsi : sous l'hypothèse Λ_{σ_1} est proche de Λ_{σ_2} , est-ce que σ_1 est proche de σ_2 ? Malheureusement la réponse est négative. Même si l'opérateur Dirichlet-Neumann est donné sans bruit de mesure, le problème inverse de conductivité n'est pas stable en général. Sous certaines conditions de régularité de σ , nous obtenons seulement la stabilité au sens du module logarithmique [6]. La continuité en terme de module logarithmique est très faible. Un petit écart sur σ peut entraîner un grand écart sur Λ_σ . Si on a seulement l'hypothèse $\sigma \in L^\infty(D)$, la stabilité n'est pas assurée. On en donnera un exemple dans la section 5.1. Pour toutes ces raisons, le problème inverse de conductivité est un problème très mal-posé.

L'avantage de ce modèle est la possibilité d'effectuer des études théoriques mais en pratique nous ne pouvons pas mesurer l'intensité en tous les points du bord. Nous nous dirigeons donc vers le modèle des électrodes qui est beaucoup plus proche des situations pratiques.

4.3 Le modèle des électrodes

Nous supposons qu'il y a N électrodes notées $\{E_i\}_{i=1}^N$ attachées sur le bord d'un conducteur en dehors desquelles, l'intensité est nulle. Ces électrodes sont modélisées par des surfaces disjointes qui sont des composantes connexes régulières du bord. Nous définissons d'abord le vecteur courant $J^k = (J_1^k, \dots, J_N^k) \in \mathbb{R}^N$ dont les composantes vérifient la condition de conservation

$$\sum_{i=1}^N J_i^k = 0.$$

Nous définissons ensuite le vecteur tension $U^k = (U_1^k, \dots, U_N^k) \in \mathbb{R}^N$ dont les composantes vérifient également la condition de conservation

$$\sum_{i=1}^N U_i^k = 0.$$

Pour la résolution du problème inverse, on choisit $N - 1$ configurations linéairement indépendantes du vecteur courant et on mesure le vecteur tension dans chacune de ces configurations. Nous allons présenter trois des principaux modèles pour estimer les intensités sur les électrodes : le modèle avec espacement (gap model), le modèle avec dérivation (shunt model) et le modèle complet (complete model). La description détaillée de chacun de ces modèles peut se trouver dans [89]. Les essais expérimentaux qui ont été réalisés dans [18] montrent que les mesures générées par le modèle des électrodes complet sont les plus proches des mesures expérimentales.

4.3.1 Modèle avec espacement

Le modèle le plus simple parmi les trois modèles des électrodes est le modèle avec espacement où l'intensité sur chaque électrode est supposée constante et où les électrodes sont supposées avoir une conductivité parfaite. L'intensité j définie dans la formule (4.4) devient donc

$$j = \begin{cases} J_i/|E_i|; & i = 1, \dots, N \ ; x \in E_i \\ 0; & x \in D \cup_{i=1}^N E_i \end{cases} \quad (4.5)$$

où $|E_i|$ désigne le volume de i ème électrode, J_i , $i = 1, \dots, N$ sont constants. La tension est donnée par la formule

$$U_i = \frac{1}{|E_i|} \int_{E_i} u dS$$

où le potentiel u vérifie

$$\begin{cases} \nabla(a \nabla u) = 0, & x \in D \\ a \frac{\partial u}{\partial n} = j, & x \in \partial D. \end{cases}$$

L'avantage de ce modèle consiste en la simplicité de son étude mathématique mais il n'est pas proche du modèle réel. L'erreur de ce modèle est de l'ordre de vingt pour cent [18].

4.3.2 Modèle avec dérivation

Les expériences physiques réalisées montrent que l'intensité sur chaque électrode n'est pas constante et que le métal dont sont constituées les électrodes a une conductivité élevée. Ces propriétés sont prises en compte dans le modèle avec dérivation où la tension sur chaque électrode est supposée constante respectant l'hypothèse de conductivité parfaite du métal. Nous notons par I_l l'intensité traversant électrode E_l et par $J = (J_1, \dots, J_N)$ le vecteur courant défini par

$$J_i = \frac{1}{|E_i|} \int_{E_i} a \frac{\partial u}{\partial n} dS; \quad i = 1, \dots, N.$$

La solution u du modèle avec dérivation vérifie

$$\begin{cases} \nabla(a\nabla u) = 0, & x \in D \\ u = U_i, & x \in E_i \\ a \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & x \in \partial D \setminus \cup E_i. \end{cases} \quad (4.6)$$

4.3.3 Modèle complet

Le modèle le plus proche du modèle réel est le modèle des électrodes complet. En réalité, le métal n'a pas une conductivité parfaite. Il a une résistance faible créée par l'épaisseur des électrodes posées sur la peau. Nous supposons que toutes les électrodes ont la même taille et les mêmes propriétés physiques. Dans ce modèle la condition $u = U_i$ dans l'équation (4.6) est remplacée par

$$u + za \frac{\partial u}{\partial n} = U_i \quad \text{sur } E_i$$

où z s'appelle l'impédance de contact. La solution u vérifie

$$\begin{cases} \nabla(a\nabla u) = 0, & x \in D \\ u + za \frac{\partial u}{\partial n} = U_i \quad \text{sur } E_i \\ a \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & x \in \partial D \setminus \cup E_i. \end{cases} \quad (4.7)$$

Le modèle complet a une erreur de l'ordre de un pour cent [18]. Bien qu'en pratique, on applique généralement l'intensité et on mesure la tension sur les électrodes, nous pouvons supposer que la tension est imposée sur les électrodes et que l'intensité est mesurée. Cette modélisation sera utilisée dans la suite du manuscrit.

4.4 Modélisation de tumeurs

4.4.1 Cas d'une seule inclusion

Il est observé dans [47] que la conductivité électrique d'un tissu contenant beaucoup d'eau comme par exemple les muscles ou les tumeurs malignes est plus élevée que la conductivité d'un tissu contenant peu d'eau comme le gras. Pour cette raison, dans ce premier modèle contenant

une seule tumeur, nous allons modéliser cette anomalie T par une inclusion sphérique avec une conductivité parfaite. L'équation de diffusion devient

$$\nabla(a\nabla u) = 0 \quad \text{dans } D \setminus T. \quad (4.8)$$

Dans le modèle des électrodes complets, nous avons N électrodes $\{E_1, \dots, E_N\}$ attachées sur le bord du domaine, le potentiel u vérifie la condition de Robin

$$za \frac{\partial u}{\partial n} + fu = g \quad \text{sur } \partial D \quad (4.9)$$

où les fonctions $f, g : \partial D \rightarrow \mathbb{R}$ sont données par

$$f = \sum_{i=1}^N \chi_i(x), \quad g = \sum_{i=1}^N U_i \chi_i(x) \quad (4.10)$$

où $\chi_i(x)$ est la fonction indicatrice de l'ensemble E_i et $z > 0$ est l'impédance de contact. On a donc des conditions de Robin sur les électrodes et des conditions de Neumann sur le reste du bord. Pour simplifier, nous choisissons la valeur de z comme la même constante positive pour chaque électrode et quelle que soit la position sur celle-ci. Finalement, l'hypothèse de conductivité électrique parfaite sur la tumeur conduit à la condition de Dirichlet sur l'inclusion

$$u = C \quad \text{sur } \partial T \quad (4.11)$$

où la valeur de la constante C sera déterminée dans la suite. Etant donné un vecteur tension $U \in \mathbb{R}^N$ satisfaisant

$$\sum_{i=1}^N U_i = 0$$

le théorème de Lax-Milgram étendu [89] montre que les équations (4.8), (4.9) et (4.11) définissent un unique couple $(u, J) \in H^1(D) \oplus \mathbb{R}^N$ où le vecteur intensité

$$J_l = \frac{1}{|E_l|} \int_{E_l} a \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma, \quad l = 1, \dots, N$$

vérifie la condition de conservation de la charge

$$\sum_{i=1}^n J_i = 0.$$

4.4.2 Modèle simple couche

Dans le modèle simple couche, nous allons considérer seulement le cas où le domaine est homogène. La conductivité $a(x)$ est définie par

$$a(x) = \begin{cases} 1 & x \in D \setminus T \\ \infty & x \in T. \end{cases} \quad (4.12)$$

Nous ne travaillerons pas avec ce modèle dans le cadre du problème inverse, mais nous allons analyser le biais de notre algorithme pour ce modèle.

4.4.3 Modèle double couche

Une caractéristique importante de l'organisme humain est que les conductivités des diverses régions occupées par les composants de base sont des constantes connues. Par exemple, les conductivités dans les muscles, les poumons, les os et le sang sont respectivement de 8.0, 1.0, 0.06, 6.7 ($S.m^{-1}$). On voit qu'elles peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur. De plus cela entraîne qu'on cherche en général uniquement à déterminer la forme de ces régions. Pour le modèle double couche, il existe une formule analytique pour le potentiel u si D est un rectangle [82] en dimension deux ou si D est un cube [51]. Dans la modélisation de tumeurs cancéreuses dans le sein, le sein est divisé en deux couches principales : une couche de gras (composante principale du sein) et une couche de peau (voir figure 4.5). Ce modèle prend en compte la différence entre la conductivité électrique du gras et la conductivité électrique de la peau. La conductivité a est définie par une fonction constante par morceaux $a : D = D_1 \cup D_2 \rightarrow \mathbb{R}$ où D_1 représente la couche de gras et D_2 représente la couche de peau. La tumeur est supposée appartenir toujours uniquement à la couche de gras D_1 . On a donc

$$a(x) = \begin{cases} a_1 & x \in D_1 \setminus T \\ a_2 & x \in D_2 \\ \infty & x \in T. \end{cases} \quad (4.13)$$

4.4.4 Le calcul de la constante sur l'inclusion

Le calcul de l'intensité J sur chaque électrode par la méthode de Monte-Carlo peut s'effectuer avec tous les outils décrits dans le chapitre deux si nous connaissons la valeur de la constante C sur l'inclusion. Dans le modèle des électrodes complet décrit par les équations (4.8), (4.9), (4.10) et (4.11), la constante C n'est pas donnée mais nous allons voir que nous pouvons la calculer grâce à la propriété de conservation de la charge.

On peut écrire la solution u de notre équation $u = u_0 + Cu_1$, où u_0 et u_1 sont solutions de l'équation (4.8) avec respectivement les conditions aux bords suivantes

$$u_0 = 0 \text{ sur } \partial T \quad za \frac{\partial u_0}{\partial n} + fu_0 = g, \text{ sur } \partial D$$

et

$$u_1 = 1 \text{ sur } \partial T, \quad za \frac{\partial u_1}{\partial n} + fu_1 = 0 \text{ sur } \partial D.$$

D'après l'équation (4.9), nous avons

$$J_l = \frac{1}{|E_l|} \int_{E_l} a \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma(x) = \frac{1}{|E_l|} \int_{E_l} \frac{U_l - u}{z} d\sigma(x). \quad (4.14)$$

Comme $\sum_{i=1}^N J_i = 0$ nous obtenons donc

$$C = \frac{\sum_{i=1}^N \int_{E_i} \frac{U_i - u_0}{z} d\sigma(x)}{\sum_{i=1}^N \int_{E_i} \frac{u_1}{z} d\sigma(x)}.$$

En particulier, si toutes les électrodes $\{E_i\}_{i=1}^N$ ont même taille notée $|E|$, comme $\sum_{i=1}^N U_i = 0$ nous obtenons finalement

$$C = \frac{-\sum_{i=1}^N \int_{E_i} u_0 d\sigma(x)}{\sum_{i=1}^N \int_{E_i} u_1 d\sigma(x)}. \quad (4.15)$$

Nous pouvons utiliser les mêmes trajectoires pour calculer à la fois les deux termes du quotient précédent. Si on note $e(i, j)$ la moyenne du nombre de fois où la marche aléatoire touche l'électrode j en partant uniformément au hasard de l'électrode i et $b(i)$ la moyenne du nombre de fois où la trajectoire touche l'inclusion en partant de l'électrode i , on peut donner une autre formule pour calculer numériquement $\int_{E_i} u_0 d\sigma(x)$ et $\int_{E_i} u_1 d\sigma(x)$ de la façon suivante

$$-\sum_{i=1}^N \int_{E_i} u_0 d\sigma(x) = -\sum_{i=1}^N |E| \sum_{j=1}^N e(i, j) U_j \frac{h}{h + za_2}$$

où h est le pas de différence finie et

$$\sum_{i=1}^N \int_{E_i} u_1 d\sigma(x) = \sum_{i=1}^N |E| b(i)$$

ce qui nous donne l'approximation

$$C = -\frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e(i, j) U_j \frac{h}{h + za_2}}{\sum_{i=1}^N b(i)}.$$

Enfin, en remplaçant l'expression de C dans (4.14), nous avons une formule pour l'intensité

$$\begin{aligned} J_l &= \frac{U_l - \int_{E_l} u(x) d\sigma(x)}{z} = \frac{U_l}{z} - \frac{\sum_{i=1}^N e(l, i) U_i \frac{h}{h + za_2}}{z} - \frac{Cb(l)}{z} \\ &= \frac{U_l}{z} - \frac{1}{z} \sum_{i=1}^N e(l, i) \frac{h}{h + za_2} U_i - \frac{1}{z} Cb(l). \end{aligned}$$

```

Data : un point  $(x_1, x_2) \in E_i$ , paramètres :  $h, z, e(i,j)=0, b(i)=0, \text{test}=1$ 
Result : les valeurs  $e(i, j), b(i)$ 
while  $\text{test} \geq 0.5$  do
  if la marche ne touche aucun bord then
    Générer une variable aléatoire  $\theta$  sur  $[0, 2\pi]$ 
    if le mouvement est à l'intérieur du domaine then
      |  $r = \min(r_1, r_2)$ , où  $r_1 = d((x_1, x_2), \Gamma)$  et  $r_2 = d((x_1, x_2), \partial T)$ 
    else
      |  $r = \min(r_1, r_3)$ , où  $r_3 = d((x_1, x_2), \partial D)$ 
    end
     $(x_1, x_2) \leftarrow (r \cos \theta, r \sin \theta)$ 
  else
    if la marche touche l'une des électrodes  $E_i$  then
       $e(i, j) \leftarrow e(i, j) + 1$ 
      Générer une variable aléatoire  $U_1$  sur  $[0, 1]$ 
      if  $U_1 \leq \frac{h}{h+z}$  then
        |  $\text{test} = 1$ 
      else
        Générer une variable aléatoire  $U_2$  sur  $[0, 1]$ 
         $\xi_1 \leftarrow 1 - h$ 
        if  $U_2 < 0.5$  then
          |  $\xi_2 \leftarrow h$ 
        else
          |  $\xi_2 \leftarrow -h$ 
        end
         $x_1 \leftarrow \xi_1 \cos \theta - \xi_2 \sin \theta$ 
         $x_2 \leftarrow \xi_1 \sin \theta + \xi_2 \cos \theta$ 
      end
    end
    if la marche touche  $\partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i$  then
      Générer une variable aléatoire  $U_2$  sur  $[0, 1]$ 
       $\xi_1 \leftarrow 1 - h$ 
      if  $U_2 < 0.5$  then
        |  $\xi_2 \leftarrow h$ 
      else
        |  $\xi_2 \leftarrow -h$ 
      end
       $x_1 \leftarrow \xi_1 \cos \theta - \xi_2 \sin \theta$ 
       $x_2 \leftarrow \xi_1 \sin \theta + \xi_2 \cos \theta$ 
    end
    if la marche touche l'interface  $\Gamma$  then
      | Utiliser le remplacement décrit dans la section 3.4.4.1
    end
    if la marche touche l'inclusion then
      |  $\text{test}=0, b(i) = b(i) + 1$ 
    end
  end
end

```

Algorithme 7 : Résolution générale pour une seule simulation

L'algorithme pour calculer le nombre de fois où le mouvement Brownien touche chaque électrode pour une seule simulation en partant de la i ème électrode est décrit dans l'algorithme 7. Dans cet algorithme, D est un domaine circulaire (voir la figure 4.5) et Γ désigne l'interface entre les sous-domaines.

4.4.5 Cas de plusieurs inclusions

Dans le cas où il y a plusieurs tumeurs, la condition de conservation du courant à elle seule ne nous permet pas de calculer les différentes constantes sur chaque inclusion. Nous allons donc revenir à un modèle encore plus proche de la réalité en choisissant la conductivité sur chaque inclusion grande par rapport à celle du reste du domaine mais finie. Donc dans le cas où il y a plusieurs tumeurs, nous allons remplacer l'équation (4.8) par l'équation

$$\nabla(a\nabla u) = 0 \text{ dans } D. \quad (4.16)$$

Si nous supposons qu'il y a m tumeurs notées T_i localisées dans D_1 , la conductivité électrique a est définie comme

$$a(x) = \begin{cases} a_1, & x \in D_1 \setminus \cup_{i=1}^m T_i \\ a_2, & x \in D_2 \\ \sigma_i, & x \in T_i \end{cases} \quad (4.17)$$

où pour modéliser les propriétés physiques des tumeurs, nous devons choisir $\sigma_i \gg a_1$. Bien évidemment, la simulation numérique de ce modèle sera plus difficile et plus chère en temps de calcul car les trajectoires à simuler ne seront plus stoppées sur les différentes inclusions.

4.5 Analyse du biais pour un modèle unidimensionnel

Nous allons analyser pour commencer le biais de l'algorithme sur un modèle en dimension un comparable dans une certaine mesure au modèle des électrodes complet avec une seule couche. Afin d'assurer l'existence et l'unicité de la solution, on va considérer une équation avec une condition de Neumann à une extrémité et une condition de Robin à l'autre extrémité. Le but est de voir l'impact des conditions de Neumann sur le biais global de l'algorithme et de se rendre compte si comme dans le cas des conditions de Robin traitées section (3.4.2), ce biais global est toujours un $O(h^2)$. L'équation en dimension un que l'on considère s'écrit

$$\begin{cases} u''(x) = 0 & x \in [0, 1] \\ \frac{\partial u}{\partial n}(0) = 0 \\ u(1) + z \frac{\partial u}{\partial n}(1) = 1. \end{cases} \quad (4.18)$$

Nous décrivons le calcul approché de $u(1)$. Comme en dimension deux, nous pouvons écrire l'approximation par différences finies au point 0 qui nous donne

$$u(0) = u(h) + O(h^3).$$

Du point de vue de la simulation si la marche touche 0, elle est remplacée au point h ce qui conduit à un biais en $O(h^3)$. De même l'approximation au point 1 nous conduit à

$$u(1) = \frac{z}{h+z}u(1-h) + \frac{h}{h+z} + O(h^3).$$

Si la marche touche 1, une quantité $\frac{h}{h+z}$ est ajouté au score. Elle s'arrête avec une probabilité $\frac{h}{h+z}$ sinon elle est remplacée au point $1-h$. Le biais est aussi en $O(h^3)$. Pour simuler le mouvement Brownien à l'intérieur d'un domaine nous avons utilisé précédemment la marche sur les sphères. En dimension un, la probabilité pour un mouvement Brownien d'atteindre 0 avant 1 en partant de x vaut tout simplement $1-x$. On peut donc combiner cette propriété et le remplacement par différences finies en 0 et en 1 en une seule étape pour décrire la dynamique de notre marche comme une chaîne de Markov $\{X_0, \dots, X_n\}$ à trois états 0, 1, 2 où 0, 1 correspondant aux positions 0 et 1 et l'état 2 correspondant au cimetière dont la chaîne ne sort plus si elle a été tuée au cours de la marche. La condition initiale est

$$\mathbb{P}(X_0 = 0) = 0, \mathbb{P}(X_0 = 1) = 1, \mathbb{P}(X_0 = 2) = 0$$

et la matrice de transition $P = (p_{ij})_{i=1,n}$ de cette chaîne est donnée par

$$\begin{aligned} p_{11} &= \mathbb{P}(X_2 = 0/X_1 = 0) = 1-h \\ p_{12} &= \mathbb{P}(X_2 = 1/X_1 = 0) = h \\ p_{13} &= \mathbb{P}(X_2 = 2/X_1 = 0) = 0 \\ p_{21} &= \mathbb{P}(X_2 = 0/X_1 = 1) = \frac{zh}{h+z} \\ p_{22} &= \mathbb{P}(X_2 = 1/X_1 = 1) = \frac{z(1-h)}{h+z} \\ p_{23} &= \mathbb{P}(X_2 = 2/X_1 = 1) = \frac{h}{h+z} \\ p_{31} &= \mathbb{P}(X_2 = 0/X_1 = 2) = 0 \\ p_{32} &= \mathbb{P}(X_2 = 1/X_1 = 2) = 0 \\ p_{33} &= \mathbb{P}(X_2 = 2/X_1 = 2) = 1 \end{aligned}$$

soit sous forme matricielle

$$P = \begin{pmatrix} 1-h & h & 0 \\ \frac{zh}{h+z} & \frac{z(1-h)}{h+z} & \frac{h}{h+z} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

et la puissance n ème de cette matrice est notée

$$P^n := \begin{pmatrix} p_{11}^{(n)} & p_{12}^{(n)} & p_{13}^{(n)} \\ p_{21}^{(n)} & p_{22}^{(n)} & p_{23}^{(n)} \\ p_{31}^{(n)} & p_{32}^{(n)} & p_{33}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

Si nous notons par a_0 la moyenne du nombre de fois où la chaîne visite l'état 0 et par a_1 la moyenne du nombre de fois où la chaîne visite l'état 1, nous pouvons écrire pour $u(1)$ la formule suivante

$$u(1) = \frac{h}{h+z} a_1 + O(h^3)(a_0 + a_1).$$

La question est maintenant d'étudier la dépendance en h de $a_0 + a_1$ pour donner le biais de notre approximation. On définit la variable aléatoire $V = \sum_{k=0}^{\infty} 1_{X_k \in \{0,1\}}$ qui vérifie $\mathbb{E}(V) = a_0 + a_1$. Nous avons

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(V) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}(X_k = 0) + \mathbb{P}(X_k = 1) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \mathbb{P}(X_0 = 1) \mathbb{P}(X_k = 0/X_0 = 1) + \mathbb{P}(X_0 = 1) \mathbb{P}(X_k = 1/X_0 = 1) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (p_{21}^{(k)} + p_{22}^{(k)}). \end{aligned} \tag{4.19}$$

Nous avons utilisé le logiciel Maple pour calculer la puissance n ème de la matrice P . En notant que

$$\begin{aligned} \lambda_1 &:= \frac{(1-h)(2z+h) - A}{2(z+h)} \\ \lambda_2 &:= \frac{(1-h)(2z+h) + A}{2(z+h)} \end{aligned}$$

où $A = h\sqrt{1-2h+h^2+4z^2+4zh}$, nous obtenons

$$\begin{aligned} p_{21}^{(n)} &= -\frac{zh}{A} \lambda_1^n + \frac{zh}{A} \lambda_2^n \\ p_{22}^{(n)} &= \frac{-h^2+h+A}{2A} \lambda_1^n + \frac{h^2-h+A}{2A} \lambda_2^n. \end{aligned}$$

Nous avons donc

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} (p_{21}^{(n)} + p_{22}^{(n)}) &= \frac{-h^2 - 2zh + h + A}{2A} \frac{1}{1 - \lambda_1} + \frac{h^2 + 2zh - h + A}{2A} \frac{1}{1 - \lambda_2} \\
&= \frac{-h^2 - 2zh + h + A}{2A} \times \frac{2(z + h)}{h^2 + 2zh + h + A} \\
&\quad + \frac{h^2 + 2zh - h + A}{2A} \times \frac{2(z + h)}{h^2 + 2zh + h - A} \\
&= \frac{z + h}{A} \times \frac{(-h^2 - 2zh + h + A)(h^2 + 2zh + h - A)}{(h^2 + 2zh + h)^2 - A^2} \\
&\quad + \frac{z + h}{A} \times \frac{(h^2 + 2zh - h + A)(h^2 + 2zh + h + A)}{(h^2 + 2zh + h)^2 - A^2} \\
&= \frac{z + h}{A} \times \frac{4Ah(2z + h)}{4h^2(h + z)} \\
&= 1 + 2\frac{z}{h}.
\end{aligned}$$

Le biais global est donc un $O(2zh^2)$. On obtient le même ordre que dans le cas de conditions de Robin multiplié par un facteur 2. Pour un domaine en dimension plus élevée, il est plus difficile d'analyser ce biais car si nous connaissons le biais local sur la partie Robin et sur la partie Neumann, nous ne connaissons pas la probabilité de toucher chaque partie. L'étude en dimension un nous permet quand même d'espérer un biais d'ordre deux pour ce type de problème.

4.6 Réduction de variance

Le but de cette section est de proposer un outil pour réduire la variance de notre méthode de Monte Carlo afin d'augmenter la vitesse de convergence. Cet outil va consister en l'utilisation de la méthode des variables de contrôle basée sur une approximation de la solution de l'équation que l'on considère par celle d'une autre équation proche de la première. Cette idée a déjà été utilisée de manière séquentielle en utilisant des approximations sur des bases polynomiales de la solution d'équations aux dérivées partielles elliptiques ([35],[36]). L'idée proposée dans [62] est un peu différente et repose sur le fait que le problème sans tumeur est proche du problème avec une ou plusieurs tumeurs. C'est justement cette proximité qui fait la difficulté du problème inverse. De plus, ceci est d'autant plus vrai que la tumeur est petite et donc plus difficile à détecter. Finalement la technique de réduction de variance sera d'autant plus efficace que le problème inverse est difficile ce qui est une très bonne chose. Nous allons décrire tout d'abord cette technique dans le cas d'une seule inclusion.

Nous supposons que u est solution du problème

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla u(x)) = 0, & x \in D \setminus T \\ \frac{\partial u(x)}{\partial n} = 0 & x \in \partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i \\ u(x) + za(x)\frac{\partial u(x)}{\partial n} = U_i, & x \in E_i \\ u(x) = C & x \in T \end{cases} \quad (\text{Problème I})$$

et v est solution du problème sans inclusion

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla v(x)) = 0, & x \in D \\ \frac{\partial v(x)}{\partial n} = 0 & x \in \partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i \\ v(x) + za(x)\frac{\partial v(x)}{\partial n} = U_i, & x \in E_i. \end{cases} \quad (\text{Problème II})$$

Nous supposons que nous connaissons la solution du problème II (soit analytiquement soit numériquement) et nous pouvons donc utiliser la solution v du problème II comme une variable de contrôle. En pratique, nous ne connaissons pas de formule analytique pour v . Nous allons précalculer une approximation de v en utilisant le logiciel Freefem++ qui repose sur la méthode des éléments finis.

Du point de vue probabiliste, les trajectoires servant à calculer les représentations Feynman-Kac de u et de v coïncident avant d'arriver à l'endroit de l'inclusion. Quand elles arrivent à cet endroit, l'une s'arrête et l'autre continue jusqu'à être tuée par la condition de Robin aux électrodes. De plus si la marche part de l'une des électrodes, la probabilité pour que la marche touche l'inclusion est très faible surtout si l'inclusion est au milieu du domaine. Donc parmi les trajectoires servant à la résolution des deux problèmes (I) et (II), beaucoup de trajectoires sont les mêmes. Ceci donne une justification probabiliste de la proximité des deux problèmes. On veut calculer par une méthode de Monte-Carlo

$$\int_{E_l} \frac{u(x)}{z} d\sigma(x).$$

On peut donc écrire

$$\int_{E_l} \frac{u(x)}{z} d\sigma(x) = \int_{E_l} \frac{u(x) - v(x)}{z} d\sigma(x) + \int_{E_l} \frac{v(x)}{z} d\sigma(x).$$

La quantité

$$\int_{E_l} \frac{v(x)}{z} d\sigma(x)$$

va être calculée à l'avance en utilisant soit une méthode d'éléments finis soit une méthode de Monte-Carlo avec beaucoup de tirages. Ceci peut se justifier car on va résoudre une seule fois le problème II et de très nombreuses fois le problème I. Il reste à calculer

$$\int_{E_l} \frac{u(x) - v(x)}{z} d\sigma(x).$$

Nous posons $w = u - v$ qui est solution de l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla w(x)) = 0, & x \in D \setminus T \\ \frac{\partial w(x)}{\partial n} = 0 & x \in \partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i \\ w(x) + za(x)\frac{\partial w(x)}{\partial n} = 0, & x \in E_i \\ w(x) = C - v(x) & x \in T. \end{cases} \quad (\text{Problème III})$$

D'un point de vue simulation, les trajectoires du problème III sont les mêmes que celles du problème I. Cependant, le score est seulement modifié quand la marche touche l'inclusion. Pour tout $x_0 \in D \setminus T$, nous pouvons donc définir un estimateur de $w(x_0)$

$$\hat{\eta}(x_0, \cdot) = \begin{cases} C - v(x_{\tau_T}) + O(\varepsilon) & \text{si la marche touche l'inclusion} \\ 0 & \text{si la marche ne touche pas l'inclusion} \end{cases}$$

où x_{τ_T} est une variable aléatoire qui désigne le point d'atteinte de l'inclusion par la marche aléatoire en partant de x_0 . Nous obtenons donc $w(x_0(\cdot)) = \mathbb{E}_{x_0(\cdot)}(\hat{\eta}(x_0(\cdot)))$ et

$$\mathbb{E}_{\mathcal{U}(E_l)}(\mathbb{E}_{x_0(\cdot)}(\hat{\eta}(x_0(\cdot), \cdot))) = \int_{E_l} \frac{u(x) - v(x)}{z} d\sigma(x)$$

où $\mathcal{U}(E_l)$ désigne la loi uniforme sur E_l . Pour mettre en oeuvre cette technique, il reste à calculer $v(x_{\tau_T})$ à chaque fois où la marche touche l'inclusion. Pour cela, nous utilisons soit le maillage éléments finis construit pour calculer $\int_{E_l} \frac{v(x)}{z} d\sigma(x)$ soit une méthode de Monte-Carlo en continuant la marche. Ces deux techniques seront décrites dans la partie (4.8).

Plus généralement, dans le cas où il y a plusieurs inclusions, nous n'avons plus une condition de Dirichlet sur ces inclusions. Par conséquent la marche ne s'arrête pas quand elle touche une inclusion. Nous supposons qu'il y a m inclusions notées T_i à l'intérieur du domaine. Chaque inclusion T_i possède une conductivité électrique notée σ_{mi} . Dans ce là u est la solution de

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(\kappa(x)\nabla u(x)) = 0, & x \in D \\ \frac{\partial u(x)}{\partial n} = 0 & x \in \partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i \\ u(x) + za(x)\frac{\partial u(x)}{\partial n} = U_i, & x \in E_i \end{cases} \quad (\text{Problème IV})$$

où

$$\kappa(x) = \begin{cases} a(x), & x \in D \setminus \cup_{i=1}^m T_i \\ \sigma_{mi}, & x \in T_i. \end{cases} \quad (4.20)$$

Nous définissons ensuite u_1 la solution de l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla u_1(x)) = 0, & x \in D \setminus \cup_{i=1}^m T_i \\ \frac{\partial u_1(x)}{\partial n} = 0 & x \in \partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i \\ u_1(x) + za(x)\frac{\partial u_1(x)}{\partial n} = U_i, & x \in E_i \\ u_1(x) = u(x) & x \in \partial T_i : \end{cases}$$

qui est aussi par construction solution du problème IV. On définit $w_1 := u_1 - v$ qui est solution de

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\nabla(a(x)\nabla w_1(x)) = 0, & x \in D \setminus \cup_{i=1}^m T_i \\ \frac{\partial w_1(x)}{\partial n} = 0 & x \in \partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i \\ w_1(x) + za(x)\frac{\partial w_1(x)}{\partial n} = 0, & x \in E_i \\ w_1(x) = u_1(x) - v(x) & x \in \cup_{i=1}^m \partial T_i. \end{cases}$$

Nous notons par

$$\tau_T = \inf\{t : x_t \in \cup_{i=1}^m \partial T_i\}$$

le premier temps de visite d'une des inclusions en partant d'un point à l'extérieur des inclusions. Le nouvel estimateur est défini cette fois ci comme

$$\hat{\eta}(x_0) = \begin{cases} u(x_{\tau_T}) - v(x_{\tau_T}) & \text{si la marche touche l'une des inclusions} \\ 0 & \text{si la marche ne touche aucune inclusion} \end{cases}$$

où $v(x_{\tau_T})$ est pré-calculé et $u(x_{\tau_T})$ est calculé selon la formule (3.23). D'un point de vue simulation, quand la marche touche la i ème inclusion une quantité $-v(x_{T_i})$ est ajoutée au score et ensuite la marche est replacée à l'un des quatres points définis par la formule (3.24) autour de $x_{\tau_{T_i}}$ d'après l'approximation (3.24) de $u(x_{T_i})$ et elle continue jusqu'à être tuée par la condition de Robin sur les électrodes.

4.7 Validation de l'analyse du biais

Dans cette sous-section, nous allons montrer sur certains exemples que l'ordre du biais de la méthode dans le modèle décrit dans la section (4.1) est toujours approximativement 2. Nous choisissons toujours un grand nombre de simulations de Monte-Carlo pour que l'erreur statistique soit plus faible que le biais. Plus précisément, dans tous les cas traités, l'erreur statistique vaut au maximum 0.0005 alors que l'erreur globale vaut au minimum 0.001. Nos expériences numériques ont été réalisées en utilisant un modèle circulaire. Ce modèle peut être utilisé pour certains systèmes de mammographie ([5],[20],[31]). Dans nos tests, le domaine D est le cercle unité centré sur l'origine. L'inclusion est aussi un cercle centré sur l'origine et de rayon 0.3. Pour des raisons de symétrie la constante sur l'inclusion vaut 0. Nous avons également validé numériquement cette propriété en utilisant Freefem++ et aussi notre méthode de Monte-Carlo. Les valeurs numériques obtenues étaient de l'ordre de 0.0001.

4.7.1 Modèle simple couche

4.7.1.1 La mesure idéale

Nous traitons tout d'abord le cas de la mesure dite idéale car dans le cadre des problèmes inverses cette modélisation suppose connue la mesure en tous les points du bord. Plus précisément, nous considérons l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u = 0, & x \in D \setminus T \\ z \frac{\partial u}{\partial n} + u = \cos(4\theta), & x \in \partial D \\ u(x) = 0 & x \in T \end{cases} \quad (4.21)$$

où les 8 électrodes seront remplacées par la fonction régulière sur le bord $\cos(4\theta)$ les modélisant. Les figures 4.1, 4.2 donnent une comparaison entre la solution de l'équation (4.21) et celle du modèle des électrodes. On observe que ces deux solutions sont très proches.

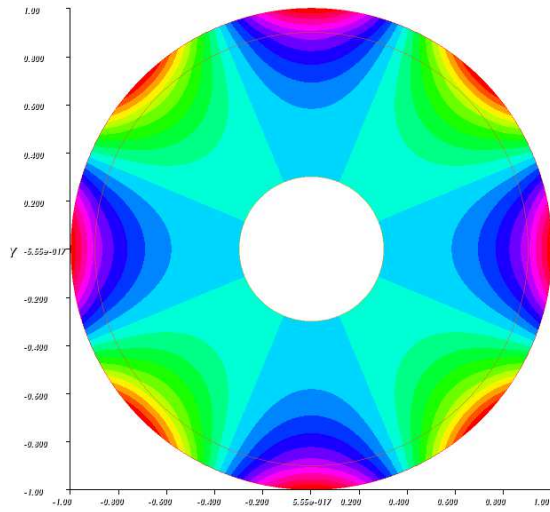


FIGURE 4.1 – La mesure idéale

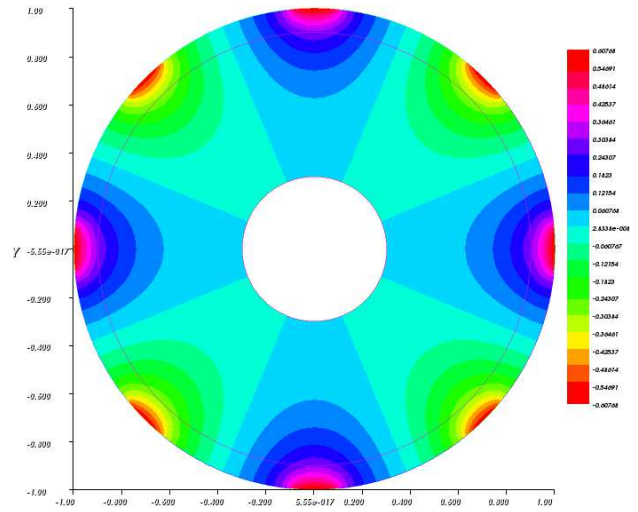
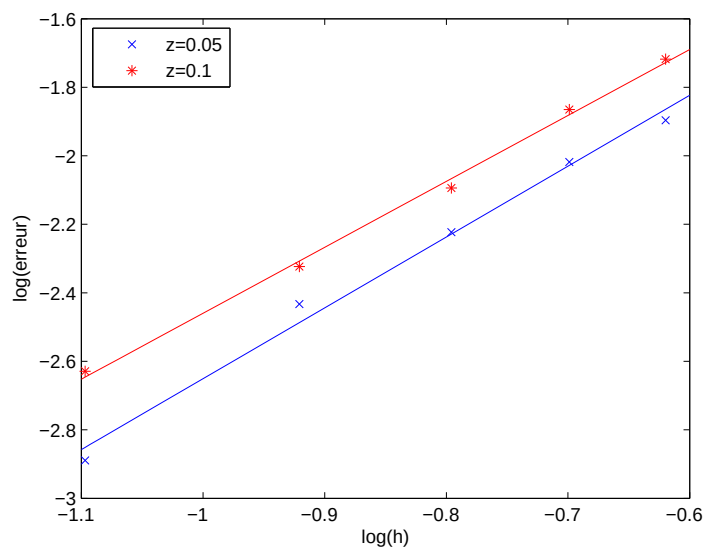


FIGURE 4.2 – La mesure discrète

L'avantage du modèle de la mesure idéale est que la fonction solution est plus régulière. Nous allons analyser l'erreur sur la solution au point $(0.99361, 0.11286)$ pour 2 valeurs de z , 0.05 et 0.1. Les valeurs de référence sont calculées par le logiciel Freefem++ et valent respectivement $(0.74951, 0.64235)$ pour respectivement $z = (0.1, 0.5)$. Nous choisissons 5 valeurs du pas h de différence finie équidistantes dans l'intervalle $[0.08, 0.24]$. La simulation est effectuée avec 10^6 tirages Monte-Carlo et le paramètre d'absorption de la marche sur les sphères vaut $\varepsilon = 10^{-6}$. Sur la figure 4.3, nous traçons en échelle logarithmique l'erreur en fonction de h pour les deux valeurs de z choisies. Les lignes rouge et bleue représentent les courbes obtenues par un ajustement par la méthode des moindres carrés. Les coefficients directeurs de la ligne rouge et bleue sont respectivement $(2.06, 1.925)$.

FIGURE 4.3 – Biais par rapport au pas h en échelle logarithmique : cas mesure idéale

L'ordre du biais est donc environ deux et ce biais augmente en fonction de z . Ceci confirme les résultats numériques précédents et l'estimation du biais dans le théorème 5. On peut même obtenir un ordre un peu supérieur à deux car la marche s'arrête sur la tumeur et nous avons choisi le pas $\epsilon = 10^{-6}$ plus petit que h^3 .

4.7.1.2 La mesure discrète

Nous considérons maintenant la mesure discrète où les mesures ne seront prises que sur les électrodes. Ceci conduit à l'équation

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u = 0, & x \in D \setminus T \\ z \frac{\partial u}{\partial n} + u = (-1)^i, & x \in E_i \\ u(x) = 0 & x \in T \end{cases}$$

où les signes des tensions valent alternativement $+1$ et -1 et

$$E_i = \{(\cos t, \sin t) : i\frac{\pi}{4} - 0.1 \leq t \leq i\frac{\pi}{4} + 0.1\}.$$

Comme ce modèle est très proche du précédent, on pourrait espérer récupérer un biais d'ordre deux pour notre méthode. Malheureusement dans le cas de la mesure discrète, le gradient ∇u n'est pas continu à la jonction entre les électrodes et la peau. Ce problème est difficile à traiter d'un point de vue numérique. Dans la méthode des éléments finis, il faut raffiner le maillage localement aux endroits où se pose ce problème.

Nous rencontrons le même problème avec notre algorithme Monte-Carlo. En effet, les formules de différences finies que nous avons développées pour les conditions de Neumann et Robin ne sont plus valables (ou du moins plus d'ordre deux) en ces points de discontinuité de gradient. Nous allons proposer une technique de raffinement local du pas dans l'esprit du raffinement de maillage. Quand la marche se rapproche des endroits qui posent problème (les extrémités des électrodes), nous allons utiliser un pas plus petit h^2 au lieu de h pour les autres parties du bord.

Nous allons maintenant calculer numériquement la solution au point $(\cos(\frac{\pi}{4} + 0.1), \sin(\frac{\pi}{4} + 0.1))$ pour trois valeurs de z qui sont respectivement $(0.01, 0.1, 0.2)$. La valeur de $u(\cos(\frac{\pi}{4} + 0.1), \sin(\frac{\pi}{4} + 0.1))$ est calculée par logiciel Freefem++ avec un maillage très raffiné (le pas d'élément fini est environ 0.001). Dans le tableau 4.1, nous comparons les valeurs de $u(\cos(\frac{\pi}{4} + 0.1), \sin(\frac{\pi}{4} + 0.1))$ obtenues par Freefem++, par la méthode de Monte Carlo normale (notée MCN) et par la méthode de Monte Carlo avec un pas raffiné (notée MCR).

z	Freefem++-cs	MCN	MCR	
			$\epsilon_2 = 0.001$	$\epsilon_2 = 0.01$
0.01	-0.8261	-0.7539	-0.8136	-0.8217
0.1	-0.4891	-0.4654	-0.4885	-0.4895
0.2	-0.3465	-0.3343	-0.3454	-0.3476

TABLE 4.1 – Comparaison entre MCN et MCR

Le pas h vaut 0.01 et nous notons par ϵ_2 la longueur des zones où nous allons remplacer le pas h par le pas h^2 . Les centres de ces zones sont les extrémités des électrodes. Le nombre de

tirages de Monte-Carlo est $N = 10^5$ et le paramètre de la marche sur les sphères est $\varepsilon = 10^{-6}$. Nous observons qu'avec MCR le résultat est amélioré et la précision de la solution augmente quand ε_2 augmente. Pour donner une idée de temps calcul nous étudions le cas $z = 0.01$. Le temps de calcul de MCN est 3.2(s), le temps de calcul de MCR avec $\varepsilon_2 = 0.001$ est 4.27(s) et le temps de calcul en utilisant $\varepsilon = 0.01$ est 18.5(s). De plus si on choisit un pas $h = 0.001$ pour MCN, le temps calcul est 19(s) pour un résultat qui vaut -0.8128 . On remarque donc que MCR avec $\varepsilon_2 = 0.001$ est 4 fois plus rapide que MCN à précision équivalente. Donc nous devons trouver un compromis entre le temps de calcul et la précision du résultat. La figure 4.4 confirme l'efficacité de MCR par rapport à MCN. Nous testons deux cas : $z = 0.05$ et $z = 0.1$. Nous calculons le biais de la moyenne de la solution sur l'électrode centrée sur $(1, 0)$. Les références sont calculées grâce au logiciel Freefem++ avec environ 10^6 noeuds et la méthode de quadrature de Gauss pour calculer les intégrales $\int_{E_s} u d\sigma(x)$ qui valent $(0.7516, 0.6033)$ respectivement. Nous prenons 5 valeurs de h équidistantes dans l'intervalle $[0.04, 0.2]$. Les simulations sont effectuées avec 10^7 tirages et $\varepsilon = 10^{-6}$.

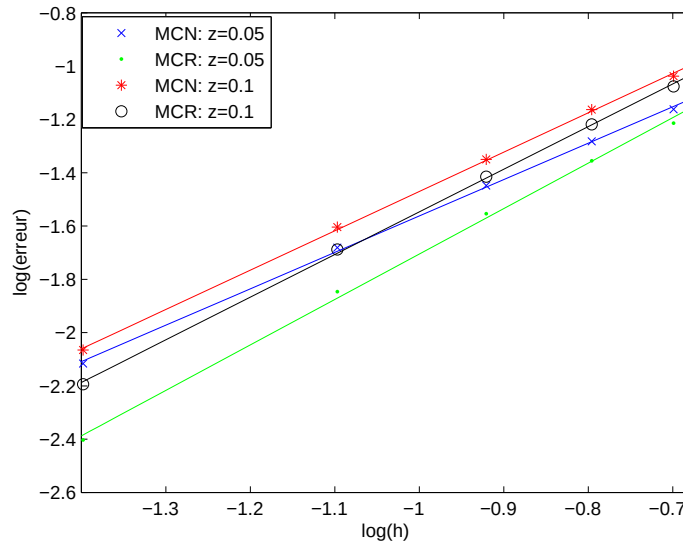


FIGURE 4.4 – Biais de MCN par rapport à MCR

L'ordre de la méthode est obtenue par régression linéaire. Les lignes rouge et bleue représentent l'ordre de la méthode normale qui vaut respectivement $(1.37, 1.46)$ pour $z = 0.05$ et $z = 0.1$. Les lignes noire et verte représentent l'ordre de la méthode en usant le pas raffiné dans une zone avec $\varepsilon_2 = 0.01$ qui vaut respectivement $(1.71, 1.6)$ pour $z = 0.05$ et $z = 0.1$. On voit bien que l'ordre augmente quand on utilise la méthode avec le pas raffiné mais l'ordre est encore plus petit que deux à cause de la discontinuité du gradient aux noeuds.

4.7.2 Modèle double couche

Nous considérons que le domaine est divisé en deux couches :

$$D_1 = \{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 \leq 0.81\} \text{ et } D_2 = D \setminus D_1$$

où D_1 modélise la couche de gras et D_2 la couche de peau. Notre modèle s'écrit

$$\begin{cases} -\nabla(a(x)\nabla u(x)) = 0, & x \in D \setminus T \\ z \frac{\partial u}{\partial n} + u = (-1)^i, & x \in E_i \\ u(x) = 0 & x \in T \end{cases}$$

où

$$a(x) = \begin{cases} 1.5, & x \in D_1 \\ 1, & x \in D_2. \end{cases}$$

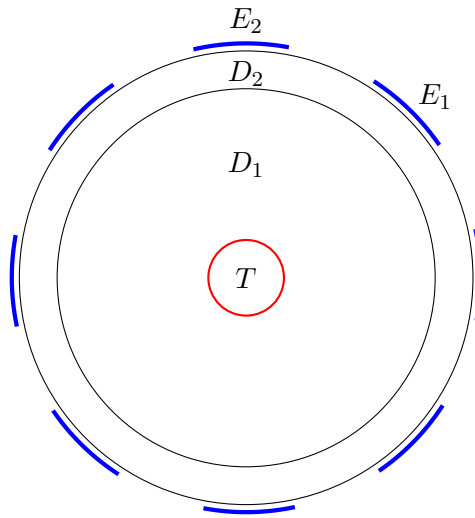


FIGURE 4.5 – Modèle du cancer du sein avec 8 électrodes.

Nous calculons la moyenne de la solution sur la huitième électrode (électrode centrée sur $(1, 0)$) pour deux valeurs de z qui valent $z_1 = 0.05$, $z_2 = 0.1$. Les valeurs de référence sont obtenues en utilisant Freefem++ et la méthode de quadrature de Gauss à 5 points qui valent $(0.7246, 0.5694)$ respectivement. Nous prenons 5 valeurs de h équidistantes dans l'intervalle $[0.02, 1]$ et lançons 10^6 simulations avec $\varepsilon = 10^{-6}$. Nous testons l'ordre du biais des deux méthodes : MCN et MCR. Les ordres de convergence de MCN sont calculés par la méthode des moindres carrés et sont respectivement $(1.381, 1.703)$ et leurs droites de moindres carrés (ligne bleue et ligne rouge respectivement dans la figure 4.6) sont

$$\log(B_{z_1}) = -0.107 + 1.381 \log(h), \quad \log(B_{z_2}) = 0.3366 + 1.703 \log(h).$$

La méthode MCR est utilisée avec le pas raffiné dans une zone de longueur $\varepsilon_2 = 0.01$. Les ordres de convergence sont respectivement $(2.05, 1.89)$. Leurs droites de moindres carrés (ligne verte et ligne noire respectivement dans la figure 4.6) sont

$$\log(B_{z_1}) = 0.509 + 2.05 \log(h), \quad \log(B_{z_2}) = 0.456 + 1.896 \log(h).$$

Nous observons que comme dans le cas d'une seule inclusion, l'ordre du biais augmente quand on utilise MCR. Nous obtenons de plus ici un ordre du biais global beaucoup plus

proche de deux que dans le cas avec une seule couche. Cela peut s'expliquer car dans le biais global la part du biais provenant de l'approximation de la solution sur l'interface est importante et celle-ci est vraiment d'ordre deux. La contribution au biais des zones qui posent problème est donc proportionnellement moins importante.

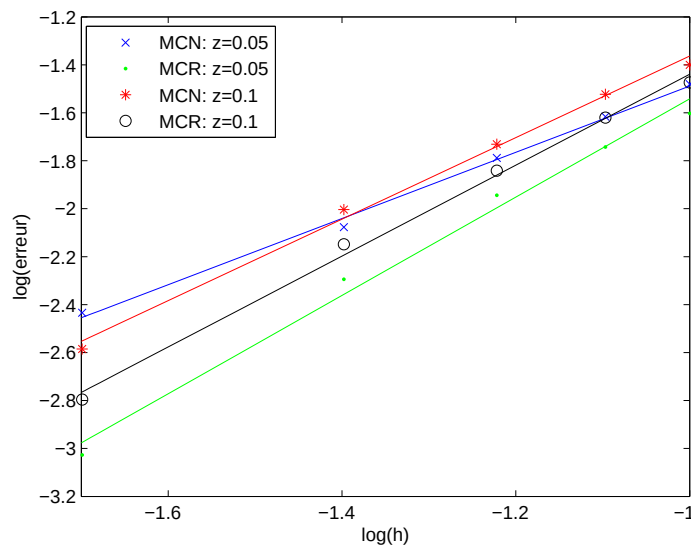


FIGURE 4.6 – MCN par rapport à MCR : cas de deux couches

4.8 Etude numérique de la méthode de réduction de variance

Dans cette section, nous allons tester l'efficacité de la technique de réduction de variance décrite dans la section (4.4.1). Pour mettre en oeuvre cette méthode nous devons calculer la solution v du problème sans inclusion à deux types d'endroits différents.

Premièrement nous devons calculer la moyenne de v sur chaque électrode. Ceci peut se faire grâce au logiciel d'éléments finis Freefem++ ou par la méthode de Monte-Carlo avec beaucoup de tirages. Ce calcul peut être coûteux mais il ne doit être fait qu'une fois quelque soit le nombre de tumeurs et leurs positions. On peut donc le considérer en partie comme du pre-processing car dans la résolution du problème inverse nous aurons à résoudre un très grand nombre d'équations avec différentes positions des tumeurs. Nous allons donc considérer comme négligeable le temps mis à calculer la moyenne de v sur les électrodes par l'une ou l'autre des deux méthodes. Deuxièmement nous devons calculer la valeur de la solution v aux points d'atteinte des tumeurs qui ne sont pas dans une zone connue à l'avance comme la position des électrodes. Ce calcul peut s'effectuer de deux manières différentes.

La première méthode se base sur la méthode des éléments finis. Le logiciel Freefem++ nous fournit un fichier qui contient la valeur de v aux noeuds du maillage. Quand la marche touche l'inclusion au point noté x_{τ_T} , nous cherchons dans le maillage les trois points les plus proches de x_{τ_T} et par une interpolation nous trouvons une approximation de la valeur de $v(x_{\tau_T})$. Cette

procédure se répète de très nombreuses fois mais une recherche exhaustive dans le fichier est à éviter. Pour réduire le temps de recherche des trois points les plus proches de x_{τ_T} nous utilisons une grille carrée, uniforme pour couvrir le domaine D . Les points du maillage sont rangés dans les petits carrés formant cette grille. Cette étape est aussi considérée comme du pre-processing. Connaissant les coordonnées de x_{τ_T} nous savons exactement quel carré contient x_{τ_T} et au lieu de calculer la distance de x_{τ_T} à tous les points du maillage, nous devons seulement calculer la distance de x_{τ_T} aux points du maillage appartenant à ce petit carré.

```

Data : Un point  $(x_1^0, x_2^0) \in E_i$  Paramètres :  $h, z, \text{score}=0, \text{test}=1, U = (U_i)_{i=1}^N$ 
Result :  $u(x_1^0, x_2^0)$ 
 $\text{score} = \text{score} + v(x_1^0, x_2^0)$ 
while  $\text{test} \geq 0.5$  do
  if La marche ne touche aucun bord then
    Générer une variable aléatoire  $\theta$  sur  $[0, 2\pi]$ 
    if le mouvement est à l'intérieur du domaine then
       $r = \min(r_1, r_2)$  où  $r_1 = d((x_1, x_2), \Gamma)$  et  $r_2 = d((x_1, x_2), \partial T)$ 
    else
       $r = \min(r_1, r_3)$  où  $r_1 = d((x_1, x_2), \partial D)$ 
    end
     $(x_1, x_2) \leftarrow (r \cos \theta, r \sin \theta)$ 
  else
    if La marche touche l'une des électrodes  $E_i$  then
      Générer une variable aléatoire  $U_1$  sur  $[0, 1]$ 
      if  $U_1 \leq \frac{h}{h+z}$  then
         $\text{Test} \leftarrow 1$ 
      else
        Générer une variable aléatoire  $U_2$  sur  $[0, 1]$ 
         $\xi_1 \leftarrow 1 - h$ 
        if  $U_2 < 0.5$  then
           $\xi_2 \leftarrow h$ 
        else
           $\xi_2 \leftarrow -h$ 
        end
         $x_1 \leftarrow \xi_1 \cos \theta - \xi_2 \sin \theta$ 
         $x_2 \leftarrow \xi_1 \sin \theta + \xi_2 \cos \theta$ 
      end
    end
    if la marche touche  $\partial D \setminus \cup_{i=1,m} E_i$  then
      Générer une variable aléatoire  $U_2$  sur  $[0, 1]$ 
       $\xi_1 \leftarrow 1 - h$ 
      if  $U_2 < 0.5$  then
         $\xi_2 \leftarrow h$ 
      else
         $\xi_2 \leftarrow -h$ 
      end
       $x_1 \leftarrow \xi_1 \cos \theta - \xi_2 \sin \theta$ 
       $x_2 \leftarrow \xi_1 \sin \theta + \xi_2 \cos \theta$ 
    end
    if la marche touche l'interface  $\Gamma$  then
      Utiliser le remplacement décrit dans la section 3.4.4.1
    end
    if La marche touche l'inclusion then
       $\text{test}=0, \text{score} = \text{score} - v(x_1, x_2)$ 
    end
  end
end

```

Algorithme 8 : L'algorithme de réduction de variance pour une seule simulation

Il est possible que les points les plus proches de x_{τ_T} se trouvent dans un carré ne contenant pas x_{τ_T} . Comme le maillage est très fin, ceci arrive avec une probabilité très faible. De plus les trois points appartenant au carré où est tombé x_{τ_T} sont aussi suffisamment proche pour obtenir une bonne interpolation. Cette technique permet donc de réduire énormément le temps de calcul en dégradant très peu l'interpolation. Ici nous allons utiliser une grille 40×40 pour trier les points du maillage.

L'approche Monte-Carlo se base sur la continuation de la marche après avoir touché l'inclusion. En effet, nous pouvons calculer $v(x_{\tau_T})$ par une méthode de Monte-Carlo, il suffit d'utiliser les algorithmes précédents en enlevant les inclusions. Quand la marche touche l'inclusion, elle continue donc jusqu'à être tuée à cause de la condition de Robin au bord. Comme il n'y a plus d'inclusion dans D_1 , nous pouvons utiliser la marche sur les sphères décentrée (voir section (2.6.2)) qui permet de replacer directement le mouvement sur l'interface entre D_1 et D_2 . Ceci permet aussi une simulation plus rapide. L'algorithme 8 nous donne la description de la marche et de son score quand on utilise la méthode de réduction de variance. Pour obtenir un calcul plus précis de $v(x_{\tau_T})$, on peut utiliser plusieurs continuations de la marche pour réduire la variance. Il faut trouver un compromis entre le nombre de marches qu'on utilise et le gain en terme de réduction de variance. Ceci sera étudié dans la suite.

4.8.1 Cas d'une inclusion en dimension deux

Dans cette section nous allons étudier l'influence sur la réduction de variance du rayon R de l'inclusion centrée en $(0, 0)$. Nous testons trois méthodes : la méthode Monte-Carlo directe, la méthode de réduction de variance se basant sur les éléments finis (notée RFF) et la méthode de réduction de variance se basant sur la continuation de la marche (notée RUWOS). Nous faisons varier le rayon R de 0.3 à 0.8. Nous calculons la moyenne $\bar{u}_{ref}$ de u sur l'électrode de référence centrée sur $(1, 0)$. Cette valeur est calculée grâce au logiciel Freefem++ et la méthode de quadrature de Gauss à 5 points. Les paramètres de différences finies et de la marche sur les sphères sont les mêmes pour les trois méthodes. Ils valent $h = 0.004$, $\varepsilon = h^3$ et nous prenons 10^4 simulations de Monte Carlo et 10 simulations pour la méthode avec la continuation de la marche. Nous définissons $C = \sigma^2 \times \text{CPU}$ le critère pour comparer l'efficacité de chaque méthode. Plus C est petit, plus la méthode est efficace.

R	$\bar{u}_{ref}$	Direct			RUWOS			RFF		
		$\bar{u}_{Dir}$	σ	C_{Dir}	$\bar{u}_{RUWOS}$	σ	C_{RUWOS}	$\bar{u}_{RFF}$	σ	C_{RFF}
0.3	0.5694	0.568	0.712	3.26	0.5679	0.17	1.24	0.5693	1.2E-3	9E-6
0.4	0.569	0.578	0.661	2.33	0.5698	0.18	1.7	0.569	4E-3	8E-5
0.5	0.568	0.574	0.629	1.807	0.5697	0.2	2.2	0.5678	0.01	5E-4
0.6	0.563	0.567	0.585	1.244	0.5636	0.2	2.8	0.563	0.02	1.8E-4
0.7	0.549	0.552	0.547	0.821	0.548	0.23	3.5	0.549	0.04	5E-3
0.8	0.5129	0.509	0.495	0.409	0.51	0.24	4.12	0.512	0.07	0.01

TABLE 4.2 – Performances des trois algorithmes en fonction de R

Nous observons que parmi les trois méthodes, RFF est beaucoup plus efficace que les autres méthodes quelque soit le rayon de l'inclusion. Quand $R < 0.5$, RUWOS est plus efficace que la

méthode directe mais quand $R > 0.5$ la méthode directe est plus efficace que RUWOS. Comme notre but est de détecter des petites tumeurs, l'utilisation de la technique de réduction de variance RUWOS reste intéressante d'autant plus qu'elle peut être adaptée facilement à un domaine en dimension trois.

On a également étudié dans le tableau 4.3 la performance $C_{RUWOS}^{(nt)}$ de RUWOS en fonction du nombre nt de continuations de la marche après avoir touché l'inclusion. On s'aperçoit que quand l'inclusion est petite, on a intérêt à augmenter nt . En effet, dans ce cas l'essentiel de la variance se trouve dans le calcul de $v(x_{\tau_T})$. Par contre quand nt est grand, la méthode de réduction de variance est moins efficace et on perd du temps à calculer précisément $v(x_{\tau_T})$. Ceci peut se voir dans le tableau 4.3 car la méthode utilisant $nt = 100$ est très efficace pour $R = 0.3$ mais beaucoup moins pour $R = 0.8$. Le choix $nt = 10$ dans le tableau 4.2 semble donc raisonnable. En revanche, pour détecter de petites tumeurs il est plus efficace de choisir nt beaucoup plus grand.

R	C_{Dir}	$C_{RUWOS}^{(1)}$	$C_{RUWOS}^{(2)}$	$C_{RUWOS}^{(10)}$	$C_{RUWOS}^{(100)}$
0.3	3.2	3.07	2.25	1.22	1.14
0.4	2.33	3.41	2.36	1.7	1.248
0.5	1.807	3.53	2.82	2.2	1.86
0.6	1.244	4.11	2.9	2.8	2.568
0.7	0.821	4.36	3.57	3.5	3.93
0.8	0.409	4.88	4.74	4.12	6.64

TABLE 4.3 – Performance de la continuation de la marche en fonction de R

4.8.2 Cas de deux inclusions en dimension deux

Nous allons tester la technique de réduction de variance dans le cas de deux inclusions. Nous supposons que la première inclusion est centrée sur $(0.5, 0.3)$, que son rayon est 0.2 et la deuxième inclusion est centrée sur $(-0.2, 0.5)$ et que son rayon est 0.3 (voir figure 4.7). Tous les autres paramètres sont choisis exactement comme dans le cas avec une seule inclusion. Le vecteur de tension est $(1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$. Nous choisissons le pas de différence finie $h = 0.01$ et nous lançons 10^5 simulations de Monte-Carlo. Nous calculons la moyenne de la solution sur chaque électrode par la méthode Monte-Carlo directe et par la méthode utilisant la technique de réduction de variance pour deux inclusions. Dans celle-ci la valeur de $v(x_{\tau_T})$ est approchée par la méthode des éléments finis. Nous devons également calculer $u(x_{\tau_T})$ car ici nous n'avons plus une condition de Dirichlet sur les inclusions. Ce calcul se fait en continuant la marche avec $nt = 1$. Les valeurs de référence sur chaque électrode sont calculées grâce au logiciel Freefem++ avec un maillage constitué de 189232 triangles (voir figure 4.8). Nous comparons la moyenne, l'écart type et le critère des deux méthodes dans le tableau 4.4. Nous observons que l'écart type σ_{RV} de la méthode de réduction de variance est 3 fois plus petit que celui de la méthode directe si la marche part de l'une des deux électrodes 1 et 2. En terme de critère, cela montre que la méthode de réduction de variance est 10 fois plus performante pour ce calcul. Par contre l'écart type ne réduit pas si la marche part de l'une des six électrodes restantes. Ceci peut très bien s'expliquer par la faible influence des inclusions sur ces 6 électrodes. Globalement, la technique de réduction de variance est encore efficace dans ce cas.

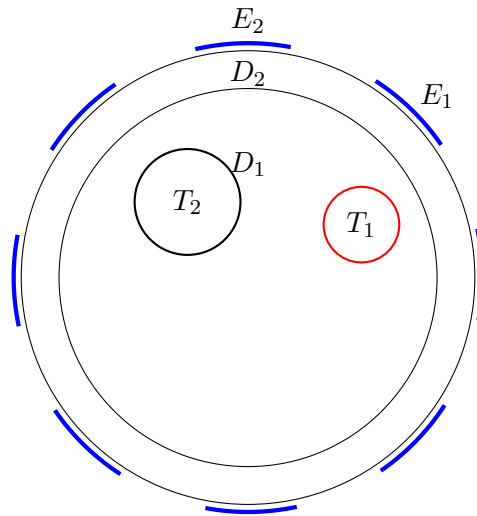


FIGURE 4.7 – Modélisation avec deux inclusions

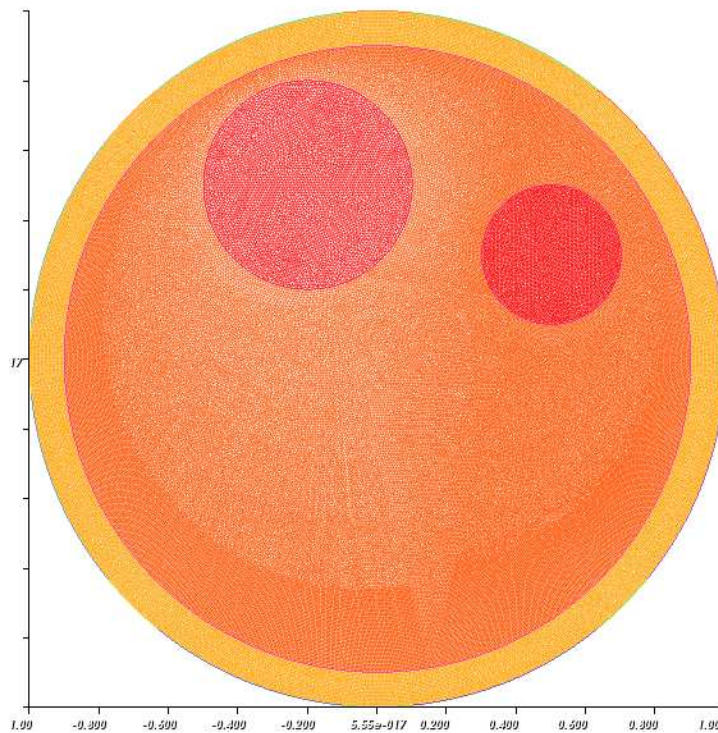


FIGURE 4.8 – Le maillage avec deux inclusions

4.8.3 Cas d'une inclusion en dimension trois

Comme nous l'avons remarqué dans la section précédente, la réduction de variance avec la continuation de la trajectoire est facile à appliquer en dimension trois. Dans cette section nous allons donc étudier cette technique sur un modèle en dimension trois avec une géométrie

Electrode	Référence	Direct			Réduction de variance		
		$\bar{u}_{Dir}$	σ_{Dir}	C	$\bar{u}_{RV}$	σ_{RV}	C
E_1	0.929	0.927	0.66	4.47	0.929	0.204	0.429
E_2	-0.9263	-0.931	0.664	4.63	-0.9265	0.201	0.43
E_3	-7.65E-3	-7E-3	0.183	0.331	-7.1E-3	0.181	0.345
E_4	-3E-3	-3E-3	0.137	0.1339	-2.89E-3	0.136	0.133
E_5	-1.1E-3	-6.6E-4	0.11	0.077	-6.4E-4	0.11	0.08
E_6	9.4E-5	-5E-5	0.115	0.08	-4.8E-4	0.11	0.08
E_7	1.8E-3	1.5E-3	0.118	0.092	1.37E-3	0.116	0.089
E_8	6.95E-3	7E-3	0.246	0.007	6.9E-3	0.165	0.24

TABLE 4.4 – Réduction de variance pour deux inclusions

plus réaliste. Le domaine D est une demi-sphère définie par

$$D = \{(x, y, z)/z \geq 0, x^2 + y^2 + z^2 \leq 1\}$$

qui est divisée en deux couches avec une frontière

$$\Gamma = \{(x, y, z)/z \geq 0, x^2 + y^2 + z^2 = 0.81\}.$$

La conductivité des couches intérieure et extérieure sont respectivement 1.5 et 1. La tumeur est modélisée par une sphère centrée en $(0, 0, 0.5)$ et de rayon R qui va varier de 0.1 à 0.3.

4.8.3.1 Quantification sur la demi-sphère

Nous voulons disposer de manière uniforme un ensemble de M électrodes sur une demi-sphère. Les électrodes sont modélisées par des calottes sphériques de même hauteur H et de rayon R . Sans perte de généralité, nous identifions les électrodes à leurs centres. Un algorithme développé dans [7] et utilisé par exemple dans [80] ou dans [66] nous permet de calculer numériquement une distribution optimale de ces points par rapport à certain critère. Nous pouvons décrire cet algorithme très rapidement comme suit : un ensemble de M points $\{x_1, \dots, x_M\}$ est distribué uniformément sur le bord de la demi-sphère. Un autre point y_0 est tiré indépendamment suivant la même loi. Nous calculons la distance entre y_0 et les M points $\{x_1, \dots, x_M\}$ pour trouver le point le plus proche de y_0 que nous notons $x_{\min}$. Nous déplaçons un peu $x_{\min}$ vers y_0 par la formule suivante

$$x_{\min} = (1 - \varepsilon)x_{\min} + \varepsilon y_0,$$

où le paramètre $\varepsilon > 0$ est petit. Le point y_0 est supprimé et un nouveau point y_1 est tiré et la procédure se répète. Le paramètre ε décroît à chaque itération. Nous utilisons ici une version de l'algorithme où le paramètre à la i ème itération est définie par

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/n,$$

où n est nombre d'itérations. Nous choisissons $\varepsilon_1 = 10^{-2}$, $\varepsilon_2 = 10^{-4}$ et $n = 5 \cdot 10^7$. La figure 4.9 représente le placement des 16 électrodes sur la demi-sphère grâce à l'algorithme que l'on vient de décrire.

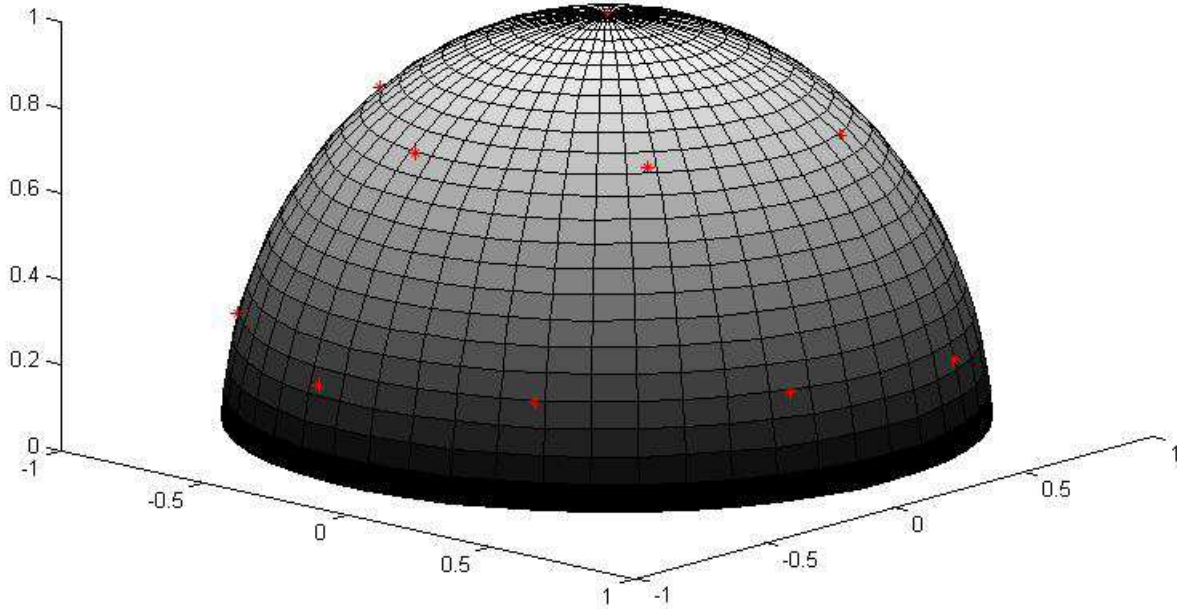


FIGURE 4.9 – Positionnement des électrodes sur la demi-sphère

4.8.3.2 Résultats numériques

Nous considérons le modèle de la demi-sphère avec 16 électrodes de hauteur $H = 0.95$ et de rayon 1. Nous avons des conditions de Robin sur les électrodes, des conditions de Neumann sur le reste de la demi-sphère et aussi sur le plan $\{(x, y, z) : z = 0\}$, une condition de Dirichlet constante sur l'inclusion. Huit électrodes choisies au hasard ont une tension égale à 1, les huit autres ont une tension égale à -1 . Nous voulons calculer la moyenne de la solution sur l'électrode centrée en $(-0.145, -0.951, 0.272)$ qui a une tension égale à -1 .

R	Normale			Réduction de Variance			$u_{E_1}^{\text{ref}}$
	$u_{E_1}^N$	σ	C	$u_{E_1}^R$	σ	C	
0.1	-0.9051	0.702	0.706	-0.903	0.084	0.012	-0.902
0.2	-0.9052	0.703	0.693	-0.903	0.093	0.0156	-0.9024
0.3	-0.9071	0.709	0.6824	-0.902	0.093	0.0146	-0.9025

TABLE 4.5 – Réduction de variance sur la demi-sphère

Les valeurs références $u_{E_1}^{\text{ref}}$ et $v_{E_1}^{\text{ref}}$ sont obtenues en lançant 10^6 simulations de Monte Carlo avec $\varepsilon = 10^{-6}$ et $h = 0.004$. La valeur $v_{E_1}^{\text{ref}} = -0.904$ est la valeur du modèle sans inclusion qui sert pour la technique de réduction de variance. Les valeurs $\bar{u}_{E_1}^{\text{Dir}}$ et $\bar{u}_{E_1}^R$ correspondent à la valeur

moyenne obtenue par la méthode directe et par la méthode de réduction de variance avec 10^5 simulations de Monte-Carlo, 10 simulations pour la méthode avec la continuation de la marche et un pas de différence finie $h = 0.01$. Nous allons tester l'efficacité de la technique de réduction de variance en fonction du rayon de l'inclusion. La constante sur l'inclusion est calculée par la formule décrite dans la section 4.4.4. Cette constante vaut $(0.184, 0.151, 0.15438)$ pour respectivement $R = (0.1, 0.2, 0.3)$. Dans le tableau 4.5 nous comparons l'écart type et la performance de chaque méthode. L'écart type réduit environ 10 fois en utilisant la technique de réduction de variance et la performance est aussi bien meilleure que celle de la méthode directe. Comme en dimension deux, plus le rayon est grand, moins la méthode est efficace mais dans la résolution du problème inverse on se concentre sur des cas où l'inclusion est petite.

4.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé des algorithmes conduisant à un estimateur biaisé pour la solution du problème direct en tomographie par impédance électrique. Une analyse théorique complète du biais a été effectuée sur un modèle en dimension un avec des conditions mixtes Robin et Neumann. Cette analyse a montré que le biais global de l'estimateur est d'ordre deux en fonction du pas de différence finie. Le biais a aussi été étudié numériquement en dimension deux. Nous avons constaté qu'il est encore d'ordre deux pour le modèle continu et un peu moins que deux pour le modèle des électrodes complets à cause de la discontinuité du gradient de la solution aux intersections entre les électrodes et le reste de la peau. Pour remédier à ce problème, nous avons proposé une technique de raffinement local du pas de différence finie aux endroits où se pose ce problème. Ceci nous permet d'augmenter l'ordre de la méthode. Nous avons ensuite proposé une méthode de réduction de variance utilisant la solution du problème sans tumeur comme variable de contrôle. L'application de la méthode de Monte-Carlo couplée avec la technique de réduction de variance donne une méthode efficace, à la fois précise et rapide. La technique de réduction de variance en précalculant la solution par Freefem++ nous permet de réduire la variance d'un facteur 10 quelque soit la taille de l'inclusion. Une autre technique se basant sur la continuation de la marche est aussi efficace si la taille de l'inclusion est petite. Cette dernière technique a également montré son efficacité en dimension trois.

Problème inverse en tomographie par impédance électrique

5.1 Introduction

Dans le chapitre 4, nous avons développé des méthodes de Monte-Carlo efficaces pour résoudre des équations aux dérivées partielles impliquant un opérateur sous forme divergence avec différentes conditions aux limites. Dans ces problèmes, les conductivités à l'intérieur du domaine ainsi que les emplacements des inclusions étaient donnés. On va maintenant s'intéresser au problème inverse qui consiste à estimer ces quantités à partir de mesures prises sur le bord du domaine. Le problème inverse de tomographie par impédance électrique consiste à reconstruire la conductivité dans le domaine à partir des mesures du courant sur des électrodes situées sur le bord du domaine.

Il existe deux types de méthodes pour effectuer cette reconstruction : les méthodes itératives et les méthodes directes [9]. La méthode de factorisation est une méthode typique dans la classe des méthodes directes. Elle permet de caractériser directement la conductivité grâce à l'opérateur Dirichlet-Neumann dans le cas du modèle continu ou grâce à la matrice de résistivité dans le cas du modèle des électrodes. Elle est adaptée à nombreux cas : domaine borné ou non-borné, problème linéaire ou non-linéaire en dimension 2 ou 3 ([14],[39],[40],[44]). Cette méthode repose sur l'harmonicité de la solution ce qui ne sera plus le cas dans le problème avec deux couches et elle est de plus très sensible aux bruits de mesure.

Notre approche va reposer sur des méthodes itératives. Ces méthodes se décomposent en deux phases, une phase de résolution du problème direct et une phase d'optimisation pour reconstruire l'inclusion ou plus généralement la conductivité à l'intérieur du domaine. Ces deux phases sont répétées de nombreuses fois jusqu'à obtenir une convergence. Les méthodes déterministes de type éléments finis de résolution du problème direct permettent d'obtenir une approximation globale de la conductivité en tous points du domaine à l'aide d'un maillage. Ce maillage et cette résolution doivent être refaits après chaque étape de la phase d'optimisation. Ceci peut-être très coûteux surtout en dimension trois d'autant plus qu'il faut beaucoup raffiner le maillage aux bords des électrodes.

Les méthodes de Monte-Carlo de résolution développées aux chapitres précédents sont très bien adaptées à ce type de problème. On ne doit pas calculer la solution partout mais uniquement la moyenne de celle-ci sur les électrodes. Ceci s'obtient aisément grâce au principe

de double randomisation pour un coût similaire en dimension deux ou trois. La technique de réduction de variance basée sur l'approximation par éléments finis du problème sans inclusion est efficace et peu coûteuse car cette résolution n'est faite qu'une fois et non pas à chaque étape. Une modélisation paramétrique de la conductivité va également permettre de conserver toute l'efficacité de cette approche. Certaines méthodes de reconstruction développées par exemple dans [88] exigent une reconstruction par zone de la conductivité. La simulation dans ces zones serait très coûteuse car il faudrait utiliser nos techniques de remplacement dans une multitude de sous-domaines. On va donc supposer que la conductivité est constante dans la peau et constante dans le gras sauf dans des zones circulaires (les tumeurs) où elle est soit infinie dans le cas d'une seule tumeur soit très grande dans le cas de plusieurs. La résolution du problème inverse va donc se ramener à identifier des paramètres (centre et rayon des inclusions) et éventuellement les conductivités dans le gras et la peau.

Pour la résolution du problème inverse, on va également proposer deux méthodes stochastiques qui sont très bien adaptées à cette modélisation sous forme de paramètres. Les deux algorithmes n'exigent aucun calcul de gradient et reposent simplement sur l'évolution d'une population dont les caractéristiques vont évoluer au cours des itérations.

Après avoir rappelé certaines propriétés du problème inverse, nous décrirons ces deux approches, l'une basée sur la méthode d'estimation de distribution et l'autre sur un algorithme mimétique. Nous testerons ces méthodes pour une seule inclusion sans bruit puis avec différents niveaux de bruit et en supposant les conductivités dans la peau et dans le gras connues ou non. On testera également le cas de deux inclusions sans bruit et avec les conductivités précédentes supposées connues.

5.2 Description du problème inverse

L'objectif du problème inverse est de déterminer la meilleure configuration qui produit les mesures bruitées $J^0 = \{J_{kl}^0\}_{k=1, N-1; l=1, N}$ recueillies sur N électrodes correspondant à $N - 1$ configurations du vecteur des tensions. Le choix le plus naturel et le plus simple est de trouver une configuration qui minimise l'erreur quadratique entre ces mesures et celles calculées à l'aide du problème direct. Si on note $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ l'espace des configurations admissibles et $x \in \Omega$ un vecteur qui contient toutes les inconnues, on définit la fonction

$$\begin{aligned} J &: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{(N-1)N} \\ x &\mapsto J(x) = (J_{kl})_{k=1, \dots, N-1, l=1, \dots, N} \end{aligned}$$

où J_{kl} est l'intensité sur la l ème électrode correspondant à la k ème configuration parmi les $N - 1$. Notre objectif est de minimiser la fonction

$$f(x) = \|J(x) - J^0\|_{L^2(\Omega)} = \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N (J_{kl} - J_{kl}^0)^2 \quad (5.1)$$

dans l'espace de recherche Ω . La fonction $f(x)$ s'appelle la fonction objectif ou la fonction coût. Dans notre cas, le vecteur x va être composé des centres et des rayons des inclusions ainsi que dans le cas les plus difficiles de la conductivité dans la peau et le gras. Afin de caractériser la difficulté de ce problème, nous allons commencer par la définition d'un problème mal-posé ou bien-posé. La définition classique se trouvant dans [38] s'énonce de la façon suivante.

Définition 4. *Un problème est dit bien posé au sens d'Hadamard s'il vérifie les conditions suivantes*

⤵ *La solution existe c'est à dire étant donné $J \in \mathbb{R}^N$ vérifiant $\sum_{l=1}^N J_l = 0$, il existe une solution $x \in \Omega$.*

⤵ *La solution est unique.*

⤵ *La solution dépend continûment des données (des observations) c'est à dire $\|x - x^0\|_\Omega$ tend vers 0 quand $\|J - J^0\|_{\mathbb{R}^{N(N-1)}}$ tend vers 0.*

Un problème ne vérifiant pas les hypothèses précédentes est un problème mal posé.

Le problème inverse en tomographie par impédance électrique est un problème mal posé pour les deux raisons suivantes :

1. S'il existe une solution du problème inverse, elle n'est quasiment jamais unique car les mesures sont souvent bruitées. Nous ne pouvons pas garantir que des configurations différentes ne peuvent pas produire les mêmes observations.
2. Ce problème n'est pas stable. Un bruit de niveau faible ajouté aux mesures peut créer un grand écart entre la solution de ce problème et celle du problème non perturbé ([2],[21]). Nous allons illustrer ceci sur un problème modèle en dimension un.

5.2.1 Un exemple d'instabilité en dimension un

On considère l'équation elliptique en dimension un [27]

$$-(a(x)u'(x))' = f \quad x \in (-1, 1) \quad u(-1) = u(1) = 0. \quad (5.2)$$

Dans cet exemple, on choisit le cas particulier $a(x) = x^2 + 1$, $u(x) = \frac{1-x^2}{2}$, ce qui conduit à $f(x) = 3x^2 + 1$.

Le problème direct consiste à calculer u étant donnés a et f . Pour le problème inverse nous supposons que f est connue et nous cherchons à retrouver a à partir des mesures de $u(x) = \frac{1-x^2}{2}$ sur tout l'intervalle $[-1, 1]$. Cette situation est beaucoup plus favorable que dans le cas réel où l'on observe uniquement des valeurs aux bords. Nous allons voir que même dans ce cas, nous rencontrons des difficultés pour retrouver a . En prenant l'intégrale des deux côtés de l'équation dans le problème (5.2) et en divisant par u' (en supposant que $u'(x)$ ne s'annule pas) nous obtenons l'expression

$$a(x) = \frac{C}{u'(x)} + \frac{1}{u'(x)} \int_{-1}^x -f(\xi) d\xi = \frac{-C+2}{x} + x^2 + 1.$$

pour $x \neq 0$ où C est une constante d'intégration qui dépend de $a(1)$. Nous voyons donc que sur cet exemple, nous ne pouvons pas déterminer a à partir uniquement des mesures de u .

Il y a deux sources d'instabilité dans ce problème [27] : premièrement, l'application $u \mapsto a$ n'est pas continue. Ceci implique qu'une petite erreur dans la mesure u peut perturber beaucoup le résultat a . Deuxièmement, le problème est instable à cause de la présence du terme $u'(x)$ au dénominateur dans la formule précédente.

5.3 L'algorithme à estimation de distribution

5.3.1 Principe général

L'estimation de distribution (EDA) a été introduite la première fois par Mühlenbein et PaaB(1996) [76] dans les algorithmes bio-inspirés (evolutionary computation en anglais). Il n'y a ni croisement ni mutation dans l'EDA. On définit comme $\text{Pop}(k)$ la population à la k ème génération et par $\text{Pop}^s(k)$ l'ensemble des meilleurs candidats sélectionnés à partir de $\text{Pop}(k)$ qui s'appelle l'ensemble des parents. Les informations statistiques sur l'ensemble des parents $\text{Pop}^s(k)$ servent à créer une distribution de probabilité a posteriori pour former la nouvelle génération $\text{Pop}(k+1)$. Dans cette nouvelle population, il peut subsister ou non des éléments de l'ancienne population $\text{Pop}(k)$. L'algorithme à estimation de distribution peut s'utiliser dans de nombreux problèmes d'optimisation comme par exemple la résolution automatique de Sudokus [68]. Il est très difficile d'analyser le comportement de l'EDA pour une population finie. Par contre la distribution d'une population infinie peut s'étudier mathématiquement et être considérée comme la limite de la distribution d'une grande population. La convergence de l'EDA est démontrée pour une population infinie dans [94]. Pour cette raison, si on choisit une grande taille de population, l'algorithme converge vers le bon résultat avec une bonne précision mais avec une vitesse de convergence lente. Si au contraire, on choisit une taille de population trop petite, l'algorithme peut converger vers un résultat faux. La question du choix optimal de la taille de la population pour un algorithme EDA général est encore ouverte. Nous allons maintenant décrire l'algorithme général d'estimation de distribution de la façon suivante

- étape 1 : On initialise la population $\text{Pop}(0)$ en tirant M points suivant une loi donnée p_0 . On pose $k = 0$.
- étape 2 : On répète les étapes 3 à 5 ci-dessous jusqu'à satisfaire un critère d'arrêt.
- étape 3 : On choisit les $P \leq M$ meilleurs individus dans la population précédente pour former un ensemble des parents $\text{Pop}^s(k)$.
- étape 4 : On crée une nouvelle loi de tirage $p_{k+1} = p(x/\text{Pop}^s(k))$ appelée estimation de distribution des individus sélectionnés.
- étape 5 : On crée une nouvelle population $\text{Pop}(k+1)$ comme un échantillon de la loi $p_{k+1}(x)$.

5.3.1.1 Application à la résolution du problème inverse

On va devoir estimer les différents paramètres comme le rayon ou le centre de la tumeur. On va ranger tous ces inconnues dans un vecteur $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_d) \in \mathbb{R}^d$ et nous supposons qu'a priori les différentes composantes vérifient $a_i \leq \gamma_i \leq b_i$. La population initiale $\text{Pop}(0)$ est constituée de M individus $\{\gamma_i = (\gamma_i^1, \dots, \gamma_i^d); i = 1, \dots, M\}$ où les $\{\gamma_i^j\}_{i=1}^M$ sont tirés uniformément et indépendamment sur $[a_j, b_j]$. En fait, en pratique, on rejette les vecteurs γ qui ne respectent pas les contraintes géométriques du domaine. Par exemple, si une partie de la tumeur est en dehors du domaine, le vecteur γ est bien évidemment rejeté. On relance jusqu'à temps qu'on ait créé une population de taille M admissible. Cette technique sera utilisée à chaque étape de l'algorithme EDA. La taille de la population est toujours M à chaque étape.

A la k ème étape, les différentes composantes des candidats $\{\gamma_i^j\}_{i=1}^M$ sont tirées suivant la

distribution $p^{(j,k)}, j = 1, \dots, d$ qui nous donne la population

$$Pop(k) = \{\gamma_i^k = (\gamma_i^{j,k})_{j=1}^d; i = 1, \dots, M, \{\gamma_i^{j,k}\}_{i=1}^M \sim p^{j,k}\}.$$

Les P meilleurs candidats

$$Pop^s(k) = \{\gamma_i^{k,s} = (\gamma_i^{j,k,s})_{j=1}^d, i = 1, \dots, P\}$$

choisis parmi la population de taille M sont ceux dont la valeur de la fonction coût est la plus petite. Pour chaque inconnue γ_i , nous calculons la distribution $r^{(j,k)}$ de chaque composante des P meilleurs candidats par

$$r^{(j,k)} = \frac{1}{2\sqrt{3}\sigma^{j,k+1}} 1_{[m^{j,k+1}-\sqrt{3}\sigma^{j,k+1}, m^{j,k+1}+\sqrt{3}\sigma^{j,k+1}]}$$

où la moyenne $m^{j,k+1}$ désigne la moyenne de la loi uniforme de la j ième composante à la k ième étape qui vaut

$$m^{j,k+1} = \frac{1}{P} \sum_{j=1}^P \gamma_i^{j,k,s}.$$

On définit de même la variance empirique par

$$\sigma^{j,k+1} = \sqrt{\frac{1}{P-1} \sum_{i=1}^P (\gamma_i^{j,k,s} - m^{j,k+1})^2}.$$

La distribution $p^{(j,k+1)}$ est mise à jour par

$$p^{(j,k+1)} = \alpha p^{(j,k)} + (1 - \alpha) r^{(j,k)} \quad (5.3)$$

où le paramètre $0 \leq \alpha \leq 1$ représente la proportion de l'ancienne population qui est conservée. Le paramètre α influence la vitesse de convergence. Si on choisit une grande valeur de α , l'algorithme converge lentement mais est plus fiable. Si on choisit α petit, l'algorithme converge plus vite mais est moins fiable. En effet, dans le cas d'un α trop petit, l'algorithme peut se bloquer dans un minimum local. On arrête l'algorithme quand les variances σ^i de toutes les composantes sont plus petites qu'un paramètre ε donné.

5.4 L'algorithme mimétique

Comme pour l'algorithme à estimation de distribution, les algorithmes mimétiques tendent à faire évoluer une population de candidats vers la solution d'un problème de minimisation. Cette évolution se fait à l'aide d'une compétition entre les candidats et d'une phase d'exploration pour chaque individu. A chaque génération, on cherche à améliorer la qualité de la population par une évolution qui est parfois aussi divisée en trois phases principales [78] : Sélection, Reproduction et Remplacement.

L'algorithme que nous allons utiliser ici appelé CEP (Collaborative Evolution of Population) [69] tend à reproduire le comportement collaboratif d'un groupe de personnes à la recherche

de champignons dans une forêt. Au départ, chaque personne cherche de manière individuelle. Ensuite, deux personnes tirées au sort communiquent entre elles pour savoir qui est au meilleur endroit. La personne au meilleur endroit ne bouge pas et l'autre vient la rejoindre pour chercher près de cet endroit. Ici la phase de sélection ou compétition entre les individus se réduit donc simplement à un duel [73] entre deux individus. L'individu qui perd le duel est cloné en l'individu qui gagne le duel. Pour la phase d'exploration, nous utilisons une recherche basée sur la simulation d'un mouvement Brownien à pas décroissant. Une version de cet algorithme a déjà été utilisé avec succès dans [91] pour un problème d'optimisation non-linéaire lié à des décompositions tensorielles.

Nous allons maintenant décrire cet algorithme pour la minimisation d'une fonction $f(x)$ où $x \in \Omega \in \mathbb{R}^d$. Pour simplifier on suppose que $\Omega = \prod_{i=1}^d [a_i, b_i]$.

1. Une population initiale

$$\Omega = \{x_1, \dots, x_M\}$$

est créée en tirant chaque individu uniformément et de manière indépendante sur Ω comme dans l'algorithme à estimation de distribution. Un pas de temps initial Δt est choisi.

2. Deux candidats x_i et x_j sont choisis uniformément parmi les M candidats ce qui revient à choisir leur indices respectifs comme

$$i = [U * M] + 1, \quad j = i + [(M - 1) * U] \pmod{M} + 1$$

où U est la variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ et où la notation $[.]$ désigne la partie entière d'un nombre.

3. On calcule les valeurs de la fonction coût $f(x_i)$ et $f(x_j)$.
4. Si $f(x_i) < f(x_j)$, x_i est inchangé et la nouvelle valeur de x_j est définie par

$$x_j = x_i + \mathcal{N}(0, (\Delta t)^2 I_d)$$

où I_d est la matrice identité en dimension d .

Si $f(x_i) > f(x_j)$, x_j est inchangé et la nouvelle valeur de x_i est définie par

$$x_i = x_j + \mathcal{N}(0, (\Delta t)^2 I_d).$$

Δt décroît en fonction des étapes.

5. L'algorithme s'arrête quand Δt est suffisamment petit.

5.5 Résultats numériques

5.5.1 Détection d'une seule inclusion par l'algorithme à estimation de distribution

Nous considérons le modèle à deux couches en dimension deux avec l'inclusion centrée au point $(0.5, 0.3)$ et de rayon 0.2. Les conductivités électriques dans D_1 et D_2 valent respectivement 1.5 et 1. La taille des électrodes est 0.2 et la distance entre ∂D_1 et ∂D vaut 0.1.

Nous supposons que les conductivités électriques a_1 et a_2 sont connues. Nous nous intéressons à localiser le centre de l'inclusion et son rayon. Dans le cas d'une seule inclusion nous supposons que l'inclusion a une conductivité électrique parfaite (infinie) et pour cette raison nous supposons que la solution est constante sur le bord de l'inclusion. Cette propriété a été validée avec le logiciel Freefem++. Pour une valeur de la conductivité à l'intérieur de l'inclusion égale à 1000, l'écart entre différents points sur le bord de l'inclusion était de l'ordre de 10^{-4} . Par ailleurs, le calcul de la constante sur l'inclusion est inclus dans la résolution du problème direct. Nous utilisons le même algorithme pour calculer la constante sur l'inclusion et l'intensité sur chaque électrode. Nous appliquons 7 vecteurs de tension $\{U^i = (U_j^i)_{j=1,8}\}_{i=1,7}$ linéairement indépendants sur les électrodes où

$$\begin{cases} U_1^i = 1 \\ U_j^i = -1 \text{ si } j = i + 1 \\ U_j^i = 0 \text{ autrement.} \end{cases} \quad (5.4)$$

Les mesures de référence recueillies sur les électrodes $\{J^i = (J_j^i)_{j=1,8}\}_{i=1,7}$ correspondant à chacun des vecteurs de tension U^i imposés sur les électrodes sont construites en utilisant l'algorithme 8 avec $n = 10^6$ simulations Monte-Carlo et le pas de différences finies $h = 0.005$. Pour ce problème avec une seule inclusion, toutes nos résolutions du problème direct sont faites avec la technique de réduction de variance basée sur l'approximation par éléments finis. Nous utilisons l'algorithme à estimation de distribution pour le problème inverse. Nous choisissons un nombre de tirages initial $n = 10^4$ suffisamment grand et un pas de différence finie $h = 0.01$ suffisamment petit pour obtenir une précision raisonnable dans la résolution du problème direct. A partir de la troisième itération, le nombre n de simulations Monte-Carlo est doublé à chaque étape afin d'obtenir une très bonne précision dans la résolution du problème direct. Pour l'algorithme d'estimation de distribution, nous prenons comme taille de population $M = 100$ et le nombre de candidats conservés vaut $P = 10$. Dans le tableau 5.1, nous donnons les moyennes empiriques $m(x_1), m(x_2), m(r)$ et les variances empiriques $Var(x_1), Var(x_2), Var(r)$ des différentes composantes (x_1, x_2, r) des P meilleurs candidats en fonction des itérations. Après seulement 3 itérations, les valeurs moyennes sont déjà proches de la solution. A la sixième étape, nous obtenons une très bonne précision pour ces valeurs. On peut également décrire comment évoluent les lois des différentes inconnues :

- A la première étape, les valeurs de x_1, x_2 sont choisies uniformément sur l'intervalle $[-1, 1]$ et le rayon r est choisi uniformément sur l'intervalle $[0, 1]$.
Si un candidat ne vérifie pas les contraintes géométriques imposées par notre problème, on effectue un autre tirage jusqu'à obtenir un candidat acceptable. Ceci peut également se produire dans les étapes suivantes mais avec une probabilité plus faible.
- A la deuxième étape, x_1 est tiré uniformément sur l'intervalle $[0.0554, 0.6246]$, x_2 est tiré sur $[-0.071, 0.586]$ et le rayon r est tiré sur l'intervalle $[0.078, 0.3467]$. La région de recherche a déjà réduit par rapport à la région initiale.
Ces nouvelles lois sont la combinaison entre les lois empiriques calculées grâce aux meilleurs candidats et l'ancienne loi avec une proportion 9 pour 1. Ceci correspond à $\alpha = 0.1$ dans la formule (5.3).

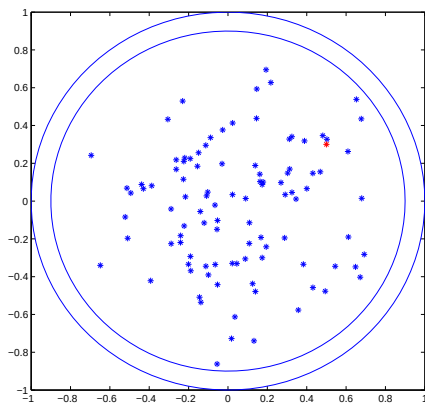
- A la troisième étape $x_1 \sim U[0.268, 0.6415]$, $x_2 \sim U[0.1654, 0.5118]$ et $r \sim U[0.092, 0.316]$.
- A la quatrième étape $x_1 \sim U[0.3661, 0.5959]$, $x_2 \sim U[0.199, 0.434]$ et $r \sim U[0.143, 0.253]$.
- A la cinquième étape $x_1 \sim U[0.448, 0.5398]$, $x_2 \sim U[0.227, 0.3594]$ et $r \sim U[0.1662, 0.2392]$.
- A la sixième étape $x_1 \sim U[0.475, 0.53]$, $x_2 \sim U[0.262, 0.329]$ et $r \sim U[0.1848, 0.2194]$.

Itération	$m(x_1)$	$\text{Var}(x_1)$	x_2	$\text{Var}(x_2)$	$m(r)$	$\text{Var}(r)$
1	0.34	0.027	0.2575	0.036	0.2125	0.006
2	0.455	0.0116	0.3386	0.01	0.2042	0.0042
3	0.481	0.0044	0.3166	0.0046	0.198	0.001
4	0.494	0.0007	0.2934	0.00145	0.2027	0.00045
5	0.503	0.00026	0.2957	0.00038	0.2021	0.0001
6	0.504	0.0001	0.3002	0.00015	0.2006	5.39E-5

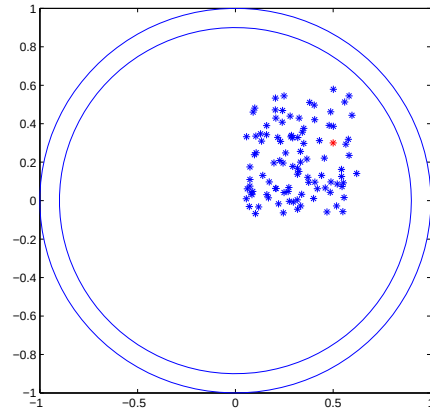
TABLE 5.1 – Algorithme à estimation de distribution+réduction de variance

Dans la figure 5.1 nous traçons l'évolution de la population à chaque étape. Le point rouge représente la position exacte de l'inclusion. Nous voyons que les 100 points se rapprochent de plus en plus de la position exacte. Dans la figure 5.2, nous traçons la position des 10 meilleurs candidats ainsi que leurs rayons. Le cercle rouge représente l'inclusion. A la première étape, les 10 meilleurs candidats sont un peu partout et leurs rayons varient beaucoup. A la deuxième itération et à la troisième itération, les 10 candidats commencent à se rapprocher de la position exacte mais leurs rayons varient encore beaucoup. Le rayon semble plus difficile à estimer que la position. A la sixième itération, tous les 10 cercles sont presque identiques et le rayon est donc finalement bien estimé.

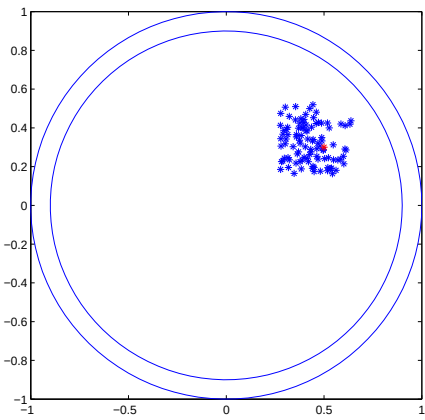
Les résultats numériques ont été implémentés en Fortran 90 et parallélisé à l'aide d'une l'interface de programmation Openmp (Open Multi-Processing) et compilé par compilateur PGI Workstation [1]. Tous nos tests sont réalisés sur un processeur Intel Core I5, 2 core CPUs. Les temps de calcul sont de l'ordre d'une vingtaine de minutes. La parallélisation a permis de gagner un facteur environ 3.7 sur les temps de calcul.



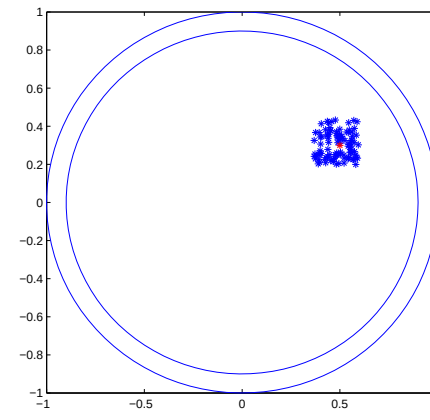
Première itération



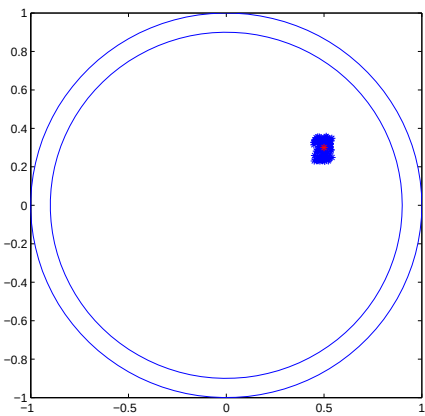
Deuxième itération



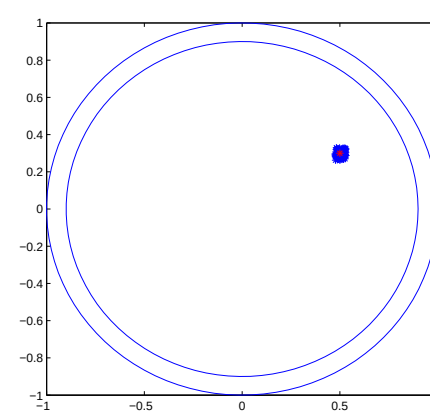
Troisième itération



Quatrième itération

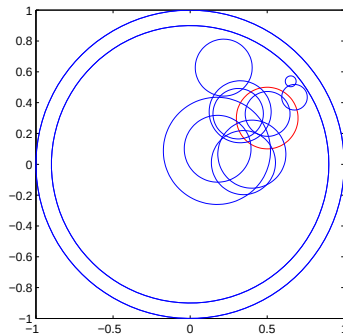


Cinquième itération

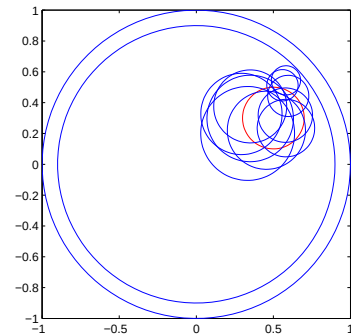


Sixième itération

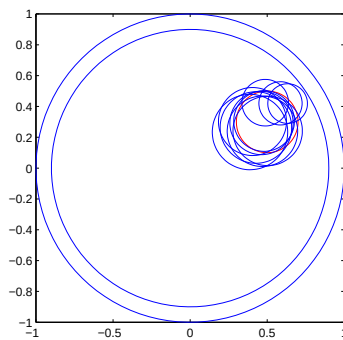
FIGURE 5.1 – Position des 100 candidats



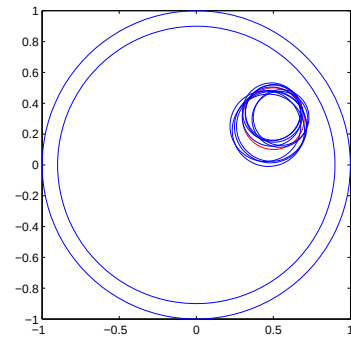
Première itération



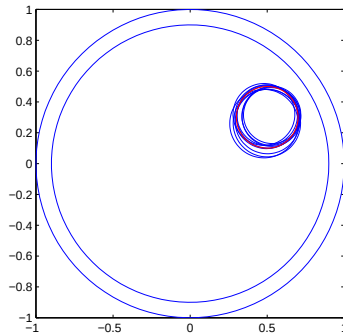
Deuxième itération



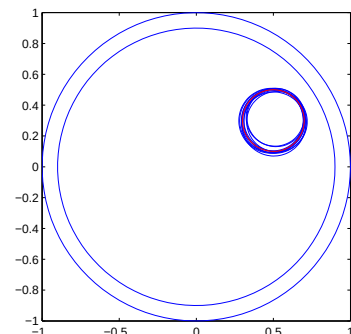
Troisième itération



Quatrième itération



Cinquième itération



Sixième itération

FIGURE 5.2 – Les 10 meilleurs cercles

5.5.2 Etude des paramètres de convergence de l'EDA

Nous allons étudier l'influence de la taille de population sur la convergence de l'algorithme à estimation de distribution. Nous utilisons l'algorithme 8 pour le problème direct. Nous allons tester trois cas avec différentes tailles de population. Nous choisissons pour les différentes tailles, le ratio entre le nombre de candidats sélectionnés et le nombre de candidats total dans la population toujours égale à $\frac{1}{10}$. Nous observons que la convergence de l'algorithme dépend de la taille de la population. Le critère de convergence est encore la variance de chaque composante. Quand $M = 100, P = 10$, l'algorithme converge après $K = 8$ étapes.

L'erreur absolue est en moyenne environ 0.001 sur chaque composante. Quand $M = 50, P = 5$, l'algorithme converge après 6 étapes et l'erreur absolue vaut en moyenne environ 0.002. Si $M = 20, P = 2$, l'algorithme converge après 3 étapes et l'erreur absolue vaut en moyenne environ 0.03. Le résultat dans le tableau 5.2 montre que plus la population est grande, plus l'algorithme converge lentement mais il est alors plus fiable.

M	P	K	x_1		x_2		rayon	
			E_{x_1}	V_{x_1}	E_{x_2}	V_{x_2}	E_r	V_r
100	10	8	0.5009	E-5	0.30016	E-5	0.2015	5E-6
50	5	6	0.5027	E-5	0.298	5E-5	0.2014	3E-6
20	2	3	0.538	6E-6	0.33	E-5	0.1755	4E-6

TABLE 5.2 – Influence de la taille de la population sur le résultat

5.5.3 Reconstruction de l'inclusion avec des mesures bruitées

Bien entendu, il est plus facile de localiser l'inclusion si nous avons des mesures idéales. Mais dans la réalité, les mesures que nous avons sont souvent bruitées. Les bruits de mesure peuvent provenir de plusieurs facteurs comme les variations de l'environnement mais aussi des erreurs sur la modélisation de la géométrie. Comme les caractéristiques de ces erreurs de mesure sont difficiles à analyser, nous allons simplement les modéliser par des Gaussiennes centrées. Pour chaque configuration du vecteur de tension, on va donc ajouter des Gaussiennes indépendantes de variance σ^2 à chaque valeur de référence de l'intensité sur les électrodes. Les différentes Gaussiennes sont également indépendantes de la configuration choisie.

La partie gauche de la figure 5.3 représente les coordonnées (x_1, x_2) des 100 candidats de la population et la partie droite représente les 10 meilleurs candidats à la 6ème étape dans le cas d'un bruit négligeable (correspondant au cas décrit dans la sous-section (5.5.1)). Les images 5.4 et 5.5 représentent la même chose pour respectivement $\sigma = 0.1$ et $\sigma = 0.2$. On observe que l'algorithme arrive à localiser approximativement la position et le rayon de l'inclusion même si le bruit est fort.

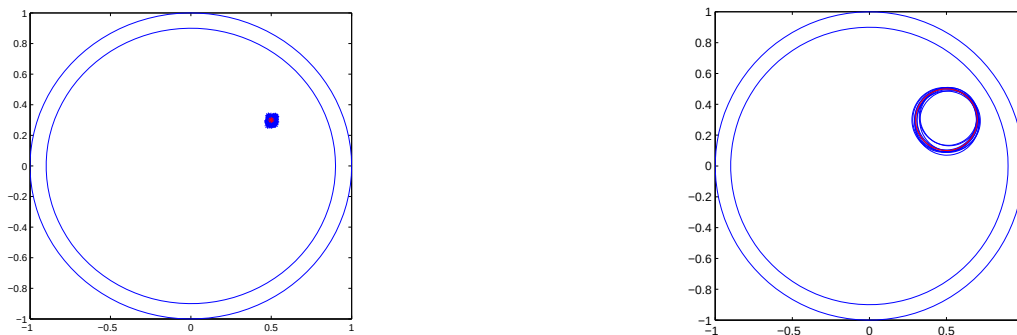
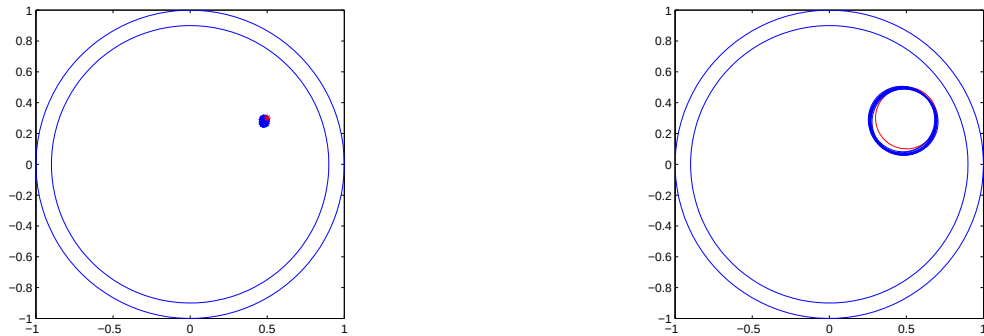
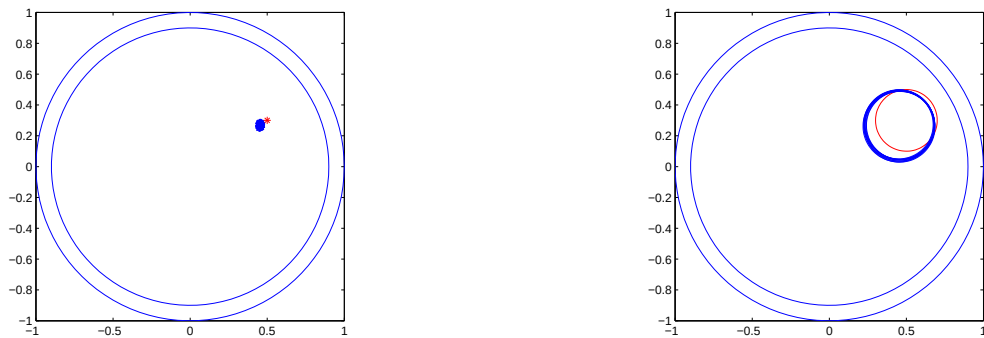


FIGURE 5.3 – Détection de l'inclusion : bruit négligeable

FIGURE 5.4 – Détection de l'inclusion : $\sigma = 0.1$ FIGURE 5.5 – Détection de l'inclusion : $\sigma = 0.2$

Ce résultat est aussi confirmé quantitativement dans le tableau 5.3 dans lequel on calcule les approximations $m(x_1), m(x_2), m(r)$. Dans le cas d'un bruit négligeable, nous obtenons une erreur moyenne d'environ 0.001. Si $\sigma = 0.1$, nous obtenons une erreur moyenne d'environ 0.02 et si $\sigma = 0.2$ nous obtenons une erreur moyenne d'environ 0.033. La reconstruction de la tumeur dans un environnement plus réaliste semble donc envisageable.

σ	$m(x_1)$	$m(x_2)$	$m(r)$
0	0.504	0.3002	0.2006
0.1	0.479	0.282	0.215
0.2	0.455	0.267	0.226

TABLE 5.3 – Sensibilité de la détection par rapport au bruit

5.5.4 Reconstruction additionnelle des conductivités

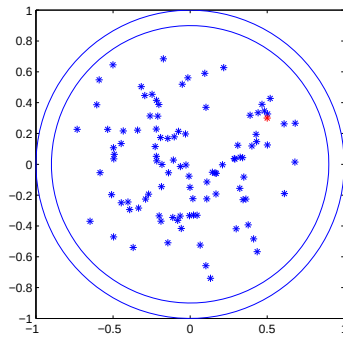
Nous allons maintenant tester un cas plus difficile. Nous supposons que la position de l'inclusion, son rayon ainsi que la conductivité électrique de la couche de la peau et du gras sont inconnus. Ce problème est encore plus difficile que le problème précédent car les conductivités a_1 et a_2 sont moins sensibles aux variations des mesures que les autres paramètres. De plus,

les techniques de réduction de variance utilisant Freefem++ ou la continuation de la marche ne fonctionnent plus car pour les utiliser nous devons pré-calculer la solution v pour chaque configuration (a_1, a_2) . Pour cette raison quand les conductivités a_1, a_2 sont inconnues, nous devons utiliser l'algorithme 7 pour calculer la fonction coût. Nous utilisons l'algorithme à estimation de distribution pour estimer les inconnues avec les paramètres $M = 100, P = 10$ et $\alpha = 0.1$. Le nombre de tirages de Monte-Carlo dans la résolution du problème direct vaut initialement $n = 2.10^5$. Les conductivités a_1 et a_2 sont tirées initialement dans l'intervalle $[0, 2]$, les valeurs de x_1, x_2 dans $[-1, 1]$ et la valeur de r dans $[0, 1]$. A partir de la deuxième itération, le nombre de tirages n est doublé à chaque étape. Nous voyons dans le tableau 5.4 que nous commençons à approcher le résultat exact à partir de la troisième itération au lieu de la deuxième quand σ_1, σ_2 sont fixées. Le temps de calcul est maintenant d'environ 24 heures

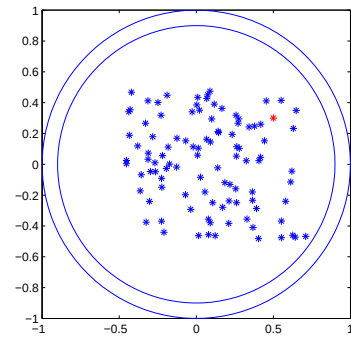
K	$m(x_1)$ $Var(x_1)$	$m(x_2)$ $Var(x_2)$	$m(r)$ $Var(r)$	$m(a_1)$ $Var(a_1)$	$m(a_2)$ $Var(a_2)$
1	0.126 0.12	-0.011 0.079	0.237 0.023	1.296 0.15	1.19 0.086
2	0.112 0.108	-0.096 0.058	0.148 0.011	1.495 0.024	1.15 0.008
3	0.228 0.04	0.028 0.03	0.132 0.003	1.53 0.016	1.09 0.003
4	0.426 0.005	0.196 0.008	0.135 0.0024	1.55 0.0098	1.07 0.002
5	0.451 0.0032	0.269 0.003	0.188 0.0004	1.5 0.0017	1.057 0.0009
6	0.491 7E-4	0.281 E-3	0.198 1.5E-4	1.48 7E-4	1.03 1.5E-4

TABLE 5.4 – EDA avec conductivités inconnues

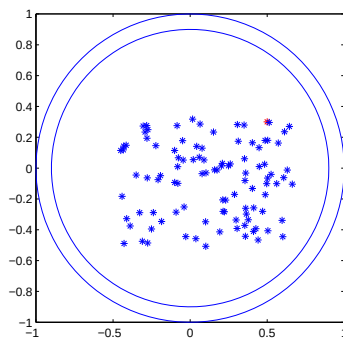
au lieu de 20 minutes dans le cas des conductivités fixées. Le temps de calcul a beaucoup augmenté car il y a plus de paramètres à estimer mais surtout parce que nous ne disposons plus de la technique de réduction de variance. Nous traçons la population à chaque étape pour visualiser le processus approchant l'endroit exact (voir la figure 5.6). L'algorithme converge après 6 itérations. Dans l'image 5.7, nous traçons les 10 meilleurs candidats et leurs rayons à chaque étape. A la sixième étape, les 10 cercles se trouvent presque au même endroit. Dans le tableau 5.4, on remarque que les valeurs de $m(x_1)$ et $m(x_2)$ et $m(r)$ sont moins précises que dans le cas où les conductivités sont connues. Les valeurs des conductivités sont estimées avec une précision de l'ordre 0.02 qui est comparable à celle sur les paramètres de l'inclusion.



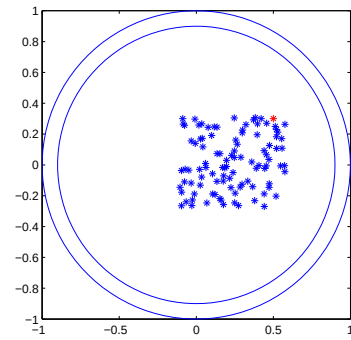
Première itération



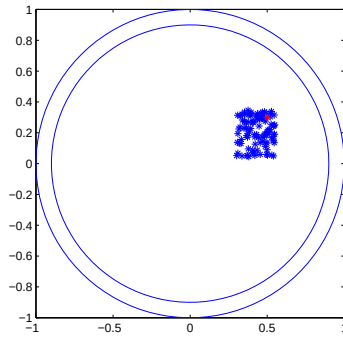
Deuxième itération



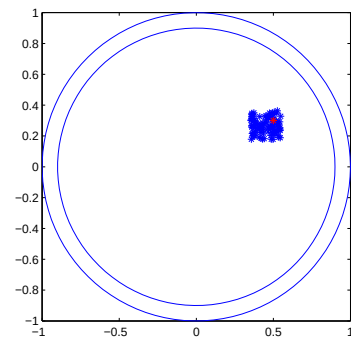
Troisième itération



Quatrième itération



Cinquième itération



Sixième itération

FIGURE 5.6 – Population avec conductivités inconnues

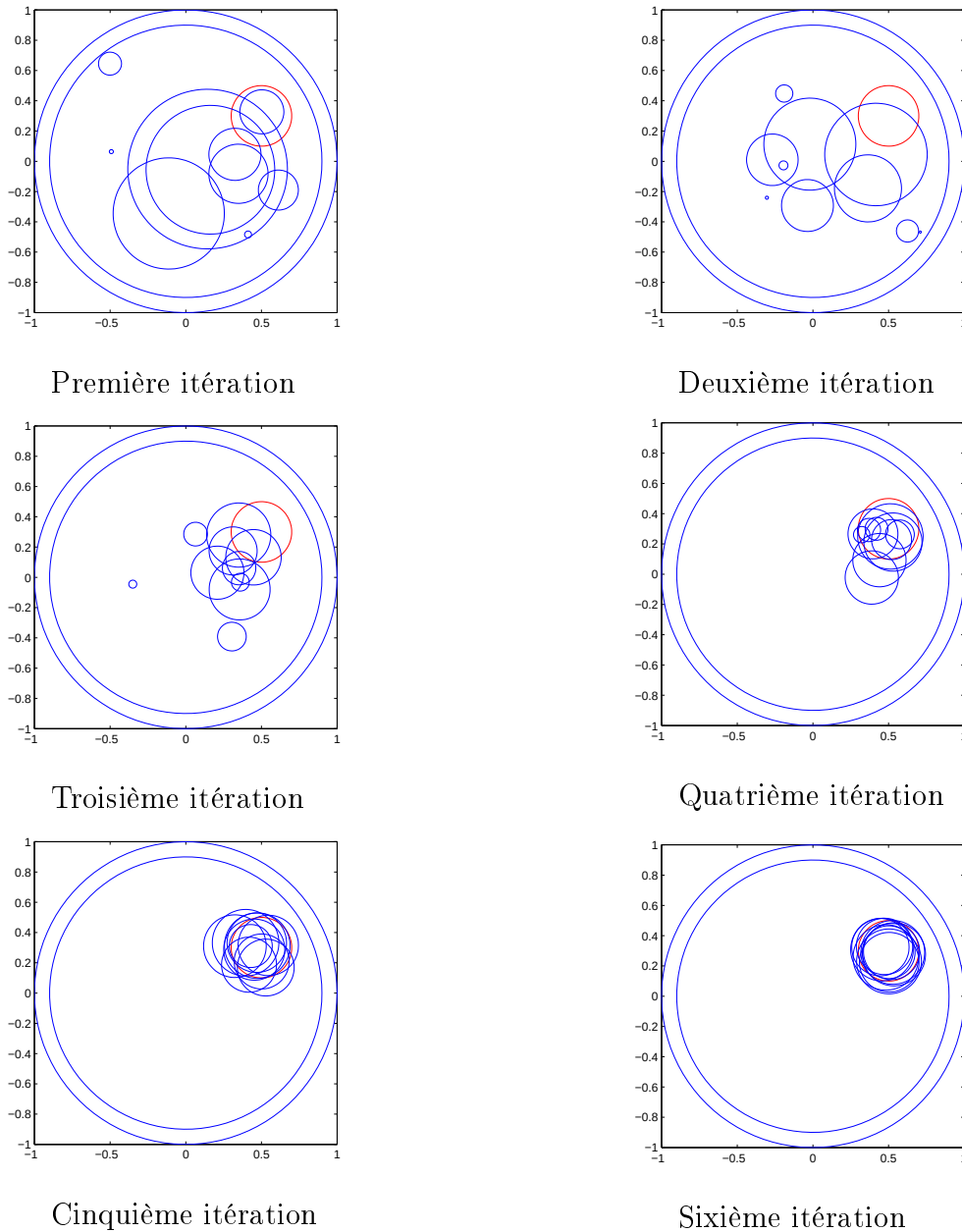
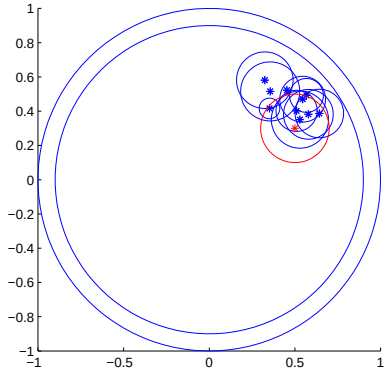


FIGURE 5.7 – Les meilleurs candidats avec conductivités inconnues

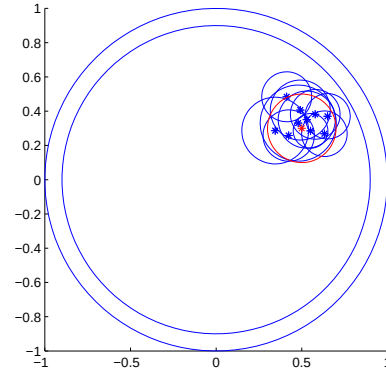
5.5.5 Détection d'une tumeur par la méthode mimétique

Nous allons revenir à la détection d'une seule inclusion sans bruit comme dans la section (5.5.1) en utilisant cette fois-ci l'algorithme mimétique de la section (5.4). Nous choisissons la taille de la population $M = 10$ et nombre d'étapes $n = 400$ pour cette méthode. Pour la résolution du problème direct, nous prenons les mêmes intensités de référence, les mêmes paramètres de l'algorithme de Monte-Carlo que ceux de la section (5.5.1) : le nombre de simulations de Monte-Carlo initial vaut 10^4 et il est doublé après chaque 100 étapes. Nous choisissons un pas initial $\Delta t_0 = 0.2$ et le pas Δt décroît en fonction du nombre i étapes comme :

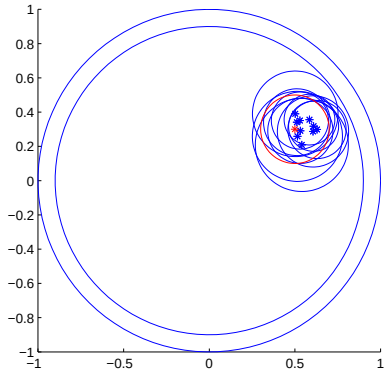
$\Delta t = \Delta t_0 \times (0.99)^i$, $\forall i = 1, \dots, n$. Après 400 étapes, Δt vaut 0.00359. Ce pas est suffisamment petit pour que la population ne bouge quasiment plus après 400 étapes. Le temps de calcul total est d'environ vingt minutes comme pour l'algorithme à estimation de distribution. Dans la figure 5.8, nous traçons la population tous les 50 étapes. Après 300 étapes, nous obtenons un résultat similaire à celui obtenu par l'algorithme à estimation de distribution à la sixième étape (voir la figure 5.2) pour un temps de calcul d'environ onze minutes (au lieu des vingt minutes précédent). Dans le tableau 5.5, nous donnons la moyenne de chaque composante des candidats à chaque itération. On observe qu'à l'étape 400, nous avons une reconstruction quasiment parfaite de la tumeur. L'algorithme semble au moins aussi efficace que l'algorithme à estimation de distribution. Il est aussi plus simple à mettre en oeuvre car il ne repose pas sur une modélisation paramétrique des lois de tirages. Le seul inconvénient est le réglage de la décroissance du pas de temps de manière automatique. C'est pour cette raison que nous avons gardé l'algorithme à estimation de distribution pour les autres tests numériques.



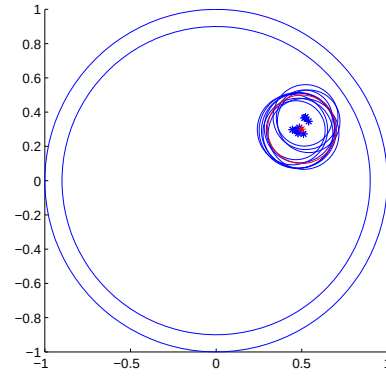
Population à la 50ème étape



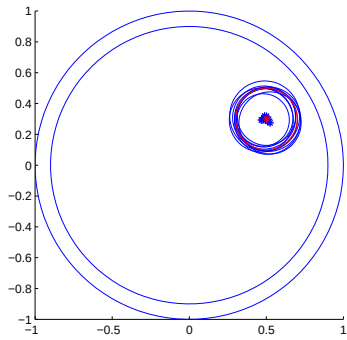
Population à la 100ème étape



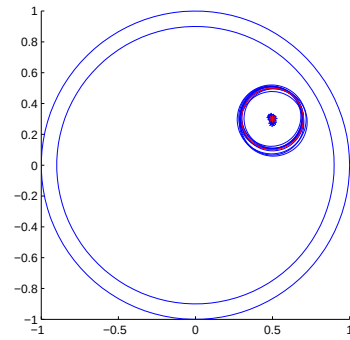
Population à la 150ème étape



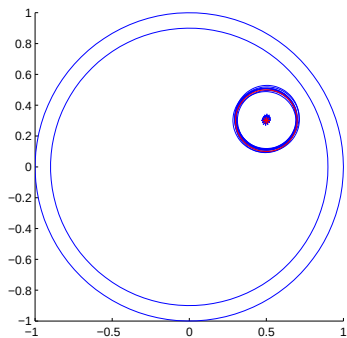
Population à la 200ème étape



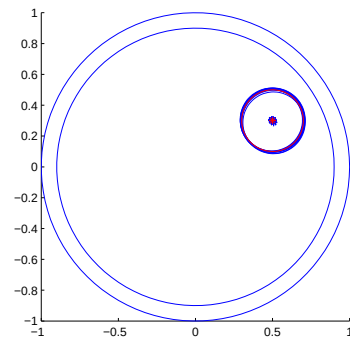
Population à la 250ème étape



Population à la 300ème étape



Population à la 350ème étape



Population à la 400ème étape

FIGURE 5.8 – Population avec la méthode mimétique

n	$m(x_1)$	$m(x_2)$	$m(r)$	Δt
50	0.486	0.452	0.121	0.121
100	0.509	0.342	0.157	0.073
150	0.556	0.31	0.201	0.044
200	0.492	0.312	0.197	0.027
250	0.495	0.299	0.2013	0.016
300	0.496	0.2996	0.2045	0.0098
350	0.4998	0.308	0.2003	0.0059
400	0.5004	0.2994	0.2035	0.00359

TABLE 5.5 – La détection d’une seule inclusion par la méthode mimétique

5.5.6 Détection de deux inclusions

Nous allons essayer de détecter deux inclusions qui sont centrées sur $(0.5, 0.3)$ et $(-0.2, 0.5)$ et donc les rayons sont respectivement 0.2 et 0.3. Nous supposons que les conductivités dans ces deux inclusions sont connues et valent 20. Les conductivités des deux couches sont aussi fixées (elles sont choisies exactement comme dans les cas précédents). Nous allons chercher les positions et les rayons des deux inclusions. Les vecteurs de tension sont choisis comme en (5.4) et les intensités de références sont construites en utilisant la méthode de Monte-Carlo directe avec 10^7 simulations et le pas de différences finies $h = 0.005$. Nous utilisons l’algorithme à estimation de distribution pour la résolution du problème inverse. Nous choisissons $M = 100$ et $P = 8$. A chaque étape, la résolution du problème direct est faite par la méthode de Monte-Carlo sans réduction de variance. Le nombre de simulations de Monte-Carlo initialement choisi est $n = 10^5$. A partir de la troisième étape, ce nombre n est doublé à chaque étape. Le pas de différences finies vaut $h = 0.01$.

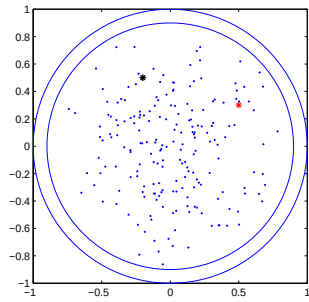
Dans la figure 5.9, nous traçons la population complète à chaque étape. Le point rouge représente le centre de l’inclusion centrée sur $(0.5, 0.3)$ et le point noir représente le centre de l’inclusion centrée sur $(-0.2, 0.5)$. Pendant les trois premières itérations, les candidats se rapprochent de la zone où il y a les deux inclusions. A partir de la quatrième étape, les composantes des candidats se séparent en deux groupes et chaque groupe va de plus en plus représenter la position de l’une ou l’autre des deux inclusions. A la huitième étape, les deux inclusions sont bien identifiées.

Ces résultats sont également confirmés dans la figure 5.10 où l’on trace les deux inclusions à partir des 8 meilleurs candidats. On remarque en particulier qu’à la huitième itération les deux inclusions sont très bien identifiées.

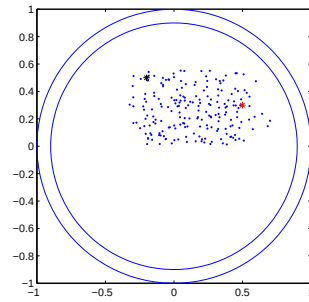
Nous allons donner maintenant des résultats plus quantitatifs. Dans le tableau 5.6, nous donnons la moyenne et la variance de chaque composante du vecteur des inconnues

$$(x_1^1, x_2^1, r^1, x_1^2, x_2^2, r^2)$$

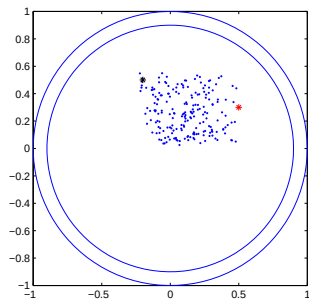
où les composantes (x_1^i, x_2^i, r^i) correspondent aux caractéristiques de l’une des deux inclusions. Ces composantes ne commencent à être représentatives des deux inclusions qu’à partir de la cinquième itération. Après 8 itérations, nous obtenons une erreur moyenne de 0.02 sur chacun des paramètres. Les deux inclusions sont bien détectées avec une précision acceptable.



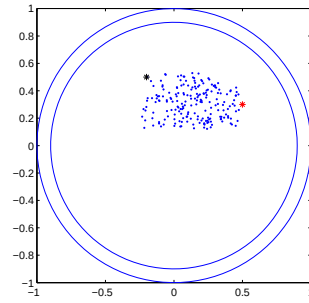
Première itération



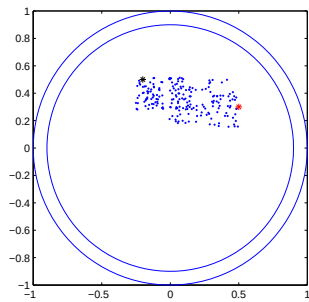
Deuxième itération



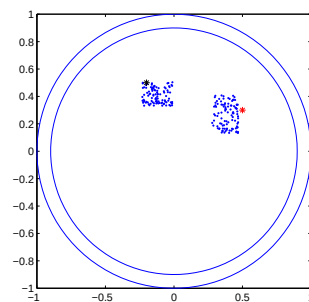
Troisième itération



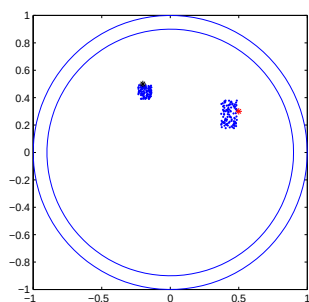
Quatrième itération



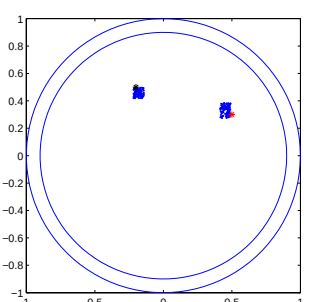
Cinquième itération



Sixième itération

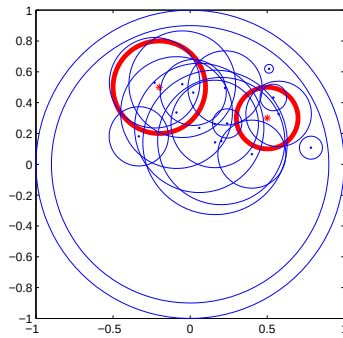


Septième itération

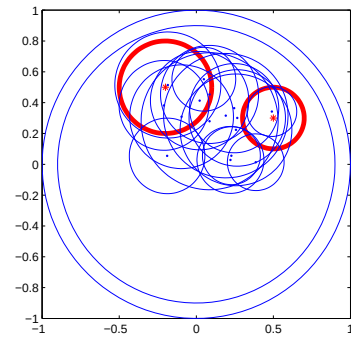


Huitième itération

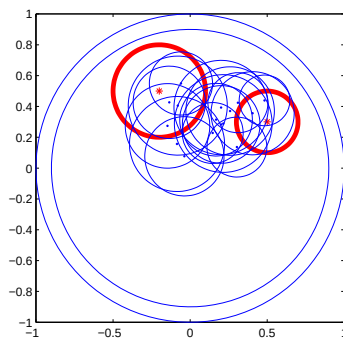
FIGURE 5.9 – La population à chaque étape



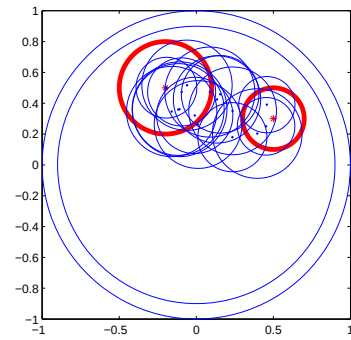
Première itération



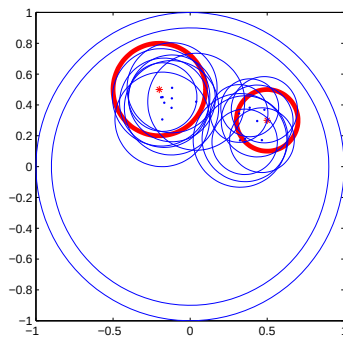
Deuxième itération



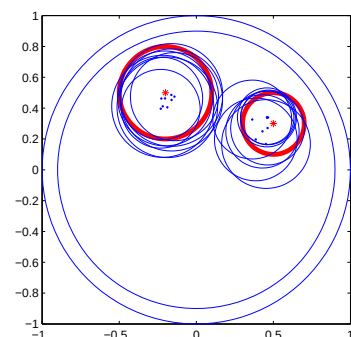
Troisième itération



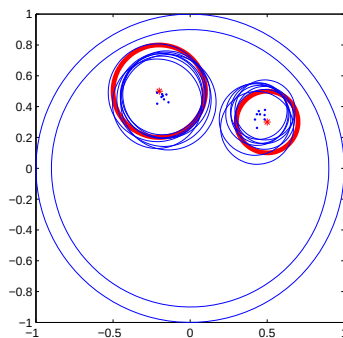
Quatrième itération



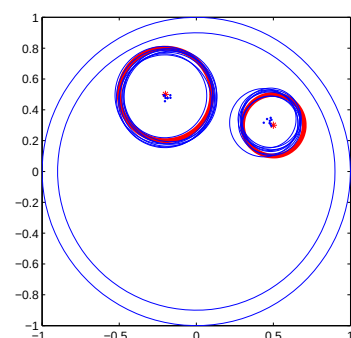
Cinquième itération



Sixième itération



Septième itération



Huitième itération

FIGURE 5.10 – Les meilleurs cercles

K	$m(x_1^1)$ $Var(x_1^1)$	$m(x_2^1)$ $Var(x_2^1)$	$m(r^1)$ $Var(r^1)$	$m(x_1^2)$ $Var(x_2^2)$	$m(x_2^2)$ $Var(x_2^2)$	$m(r^2)$ $Var(r^2)$
1	0.2447 7.4E-2	0.283 2.48E-2	0.234 5.4E-3	0.113 6.6E-2	0.295 2.6E-2	0.31 2E-2
2	6E-2 2.7E-2	0.302 2.1E-2	0.27 2.2E-3	0.184 3.1E-2	..274 2.3E-2	0.303 8E-3
3	3E-2 2.36E-2	0.326 1.43E-2	0.27 1.93E-3	0.236 1.9E-2	0.3077 E-2	0.2396 1.36E-3
4	-0.054 1.28E-2	0.396 4.6E-3	0.268 1.2E-3	0.24 2.2E-2	0.328 E-2	0.248 1.53E-3
5	-0.122 4.1E-3	0.266 2.6E-3	0.231 6.6E-4	0.375 3.1E-3	0.266 7E-3	0.231 1.26E-3
6	-0.184 8.4E-4	0.442 8.6E-4	0.303 7E-4	0.429 1.12E-3	0.277 3.5E-3	0.229 1.34E-3
7	-0.18 4.8E-4	0.458 4.8E-4	0.29 3E-4	0.452 4.9E-3	0.331 1.2E-3	0.205 3.17E-4
8	-0.19 2E-4	0.478 1.28E-4	0.301 1.5E-4	0.471 2.1E-4	0.324 2.3E-4	0.196 1.1E-4

TABLE 5.6 – EDA pour deux inclusions

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé un couplage entre des méthodes d'optimisation stochastique et la résolution du problème direct par une méthode de Monte-Carlo pour la résolution d'un problème inverse en tomographie par impédance électrique. Les résultats obtenus dans le cas d'une seule tumeur, que ce soit avec des mesures bruitées ou non, sont très prometteurs. En particulier, les techniques de réduction de variance de résolution du problème direct permettent une reconstruction quasi-parfaite de la tumeur avec des temps de calcul très raisonnables. Dans le cas où les conductivités sont inconnues ou quand il y a deux inclusions, ces méthodes donnent des résultats moins bons à la fois en terme de précision et de temps calcul. En effet, le problème direct se résout plus difficilement car les techniques de réduction de variance sont moins efficaces voire inutilisables et on n'a plus forcément des conditions de Dirichlet sur les inclusions. De même, le problème inverse est plus compliqué à résoudre car il y a plus de paramètres à estimer. Cependant, au prix d'un coût de calcul plus important nous obtenons quand même une bonne reconstruction de la conductivité dans tous les cas traités. Evidemment dans cette thèse, nous avons travaillé avec des modèles simplifiés et nous n'avons pas de vraies mesures. Cependant à cause de leur simplicité, les méthodes développées dans cette section devraient pouvoir s'appliquer à des géométries réelles.

Bibliographie

- [1] Pgi compiler user's guide. [Online]. Available : <http://www.pgroup.com/doc/pgiug.pdf>
- [2] G. Alessandrini, "Stable determination of conductivity by boundary measurements," *in* Appl. Anal., vol. 27, pp. 153–172, 1998.
- [3] K. Astala and L. Päiväranta, "Calderón's inverse conductivity problem in the plane," *in* Ann. of Math., vol. 163, pp. 265–299, 2006.
- [4] K. Astala, L. Päiväranta, and M. Lassas, "Calderón's inverse problem for anisotropic conductivity in the plane," *in* Comm. Partial Differential Equations, vol. 30, pp. 207–224, 2005.
- [5] M. Azzouz, M. Hanke, C. Oesterlein, and K. Schilcher, "The factorization method for electrical impedance tomography data from a new planar device," *in* Int. J. Biomed. Imaging, 2007.
- [6] T. Barceló, D. Faraco, and A. Ruiz, "Stability of Calderón inverse conductivity problem in the plane," *in* Journal de Mathématiques Pures et Appliquées, vol. 88, pp. 522–556, 2007.
- [7] A. Benveniste, M. Metivier, and P. Priouret, *Adaptive Algorithms et Approximations Stochastique*, Applications of Mathematics. Springer Verlag, 1990, vol. 22.
- [8] K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics : An Introduction*, Springer series in solid state sciences. Springer, 1988.
- [9] L. Borcea, "Electrical impedance tomography," *in* Inverse Problems, vol. 18, no. 6, 2002.
- [10] A. N. Borodin and P. Salminen, *Handbook of Brownian motion : Facts and Formulae*, Probability and its applications. Birkhauser Verlag, 1996.
- [11] M. Bossy, N. Champagnat, H. Leman, S. Maire, L. Violeau, and M. Yvinec, "Monte Carlo methods for linear and non-linear Poisson-Boltzmann equation," *in* ESAIM : Proc., vol. 48, pp. 420–446, 2015.
- [12] M. Bossy, N. Champagnat, S. Maire, and D. Talay, "Probabilistic interpretation and random walk on spheres algorithms for the Poisson-Boltzmann equation in molecular dynamics," *in* ESAIM M2AN, vol. 44, pp. 997–1048, 2010.
- [13] M. Bossy, E. Gobet, and D. Talay, "A symmetrized Euler scheme for an efficient approximation of reflected diffusions," *in* J. Appl. Probab., vol. 41, no. 3, pp. 877–889, Sep. 2004.

- [14] M. Brühl, “Explicit characterization of inclusions in electrical impedance tomography,” in *SIAM J. Math. Anal.*, vol. 32, no. 6, pp. 1327–1341, 2001.
- [15] A.-P. Calderón, “On an inverse boundary value problem,” in *Seminar on Numerical Analysis and its Applications to Continuum Physics (Rio de Janeiro, 1980)*, pp. 65–73, 1980.
- [16] R. Cantrell and C. Cosner, “Diffusion models for population dynamics incorporating individual behavior at boundaries : applications to refuge design,” in *Theo. Popul. Biol.*, vol. 55, pp. 189–207, 1999.
- [17] M. Cheney and D. Isaacson, “Electrical impedance tomography,” in *SIAM Rev.*, vol. 41, 1999.
- [18] K.-S. Cheng, D. Isaacson, J. C. Newell, and D. G. Gisser, “Electrode models for electric current computed tomography,” in *IEEE Trans. Biomed. Engrg.* 3, vol. 36, 1989.
- [19] V. Cherepenin, A. Karpov, A. Korjenevsky, Y. Kultiasov, M. Ochapkin, O. Trochanova, and M. J. D., “Three-dimensional EIT imaging of breast tissues system design and clinical testing,” in *IEEE Trans. Med. Imaging*, 2002.
- [20] M. H. Choi, T.-J. Kao, D. Isaacson, G. J. Saulnier, and J. C. Newell, “A Reconstruction Algorithm for Breast Cancer Imaging With Electrical Impedance Tomography in Mammography Geometry,” in *IEEE Trans. Biomed. Engineering*, vol. 54, pp. 700–710, 2007.
- [21] M. D. Cristo and L. Rondi, “Examples of exponential instability for inverse inclusion and scattering problems,” in *Inverse Problems*, vol. 19, p. 685, 2003.
- [22] R. Dautray, M. Cessenat, G. Ledanois, P.-L. Lions, E. Pardoux, and S. R., *Méthode Probabilistes pour les Equations de la Physique*. Eyrolles, 1989.
- [23] M. Deaconu and A. Lejay, “A random walk on rectangles algorithm,” in *Methodol. Comput. Appl. Probab.*, vol. 8, pp. 135–151, 2006.
- [24] J. M. Delaurentis and L. Romero, “A Monte Carlo method for Poisson’s equation,” in *Journal of Computational Physics*, vol. 90, no. 1, pp. 123 – 140, 1990.
- [25] J. Dick and F. Pillichshammer, *Digital Nets and Sequences : Discrepancy Theory and Quasi-Monte Carlo Integration*. New York, NY, USA : Cambridge University Press, 2010.
- [26] I. T. Dimov, *Monte Carlo Methods for Applied Scientists*. World Scientific, 2008.
- [27] H. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer, *Regularization of Inverse Problems*, Mathematics and Its Applications. Springer, 1996.
- [28] P. Etoré, “Approximation de processus de diffusion à coefficients discontinus en dimension un et applications à la simulation,” Ph.D. dissertation, Université Henri Poincaré - Nancy I, 2006.
- [29] P. Etoré, “On random walk simulation of one-dimensional diffusion processes with discontinuous coefficients,” in *Electron. J. Probab.*, vol. 11, pp. 249–275, 2006.
- [30] G.A.Mikhailov and R. Makarov, “Solution of boundary value problems of the second and third kind by the Monte Carlo methods,” in *Siberian Math. J.* 38, pp. 518–527, 1997.

- [31] K.-H. Georgia, C. Hähnlein, K. Schilcher, C. Sebuc, and H. Spiesberger, “Conductivity reconstructions using real data from a new planar electrical impedance tomography device,” *in* *Inverse Probl. Sci. En.*, vol. 21, pp. 801–822, 2013.
- [32] P. Glasserman, *Monte Carlo Methods in Financial Engineering*, Applications of mathematics. New York : Springer, 2004.
- [33] E. Gobet, “Euler schemes and half-space approximation for the simulation of diffusion in a domain,” *in* *ESAIM Probab. Statist.*, vol. 5, pp. 261–297, 2001.
- [34] E. Gobet, Ed., *Méthodes de Monte-Carlo et processus stochastiques : du linéaire au non linéaire*. Ecole Polytechnique, 2013.
- [35] E. Gobet and S. Maire, “A spectral Monte Carlo method for the Poisson equation,” *in* *Monte Carlo methods and applications*, vol. 10, pp. 275–285, 2004.
- [36] E. Gobet and S. Maire, “Sequential control variates for functionals of Markov processes,” *in* *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 43, pp. 1256–1275, 2006.
- [37] E. Gobet, “Weak approximation of killed diffusion using Euler schemes,” *in* *Stoch. Proc. Appl.*, vol. 87, pp. 167–197, 2000.
- [38] J. Hadamard, “Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique,” *in* *Princeton University Bulletin*, vol. 13, pp. 49–52, 1902.
- [39] M. Hanke and M. Bruhl, “Recent progress in electrical impedance tomography,” *in* *Inverse Problems*, vol. 19, p. S65, 2003.
- [40] M. Hanke and B. Schappel, “The Factorization Method for Electrical Impedance Tomography in the Half-Space,” *in* *SIAM J. Appl. Math.*, vol. 68, no. 4, pp. 907–924, 2008.
- [41] A. Hartov, N. K. Soni, and K. D. Paulsen, “Variation in breast EIT measurements due to menstrual cycle,” *in* *Physiological Measurement*, vol. 25, p. 295, 2004.
- [42] H. Hoteit, R. Mose, A. Younes, F. Lehmann, and Ph. Ackerer, “Three-dimensional modeling of mass transfer in porous media using the mixed hybrid finite elements and the random-walk methods,” *in* *Math. Geology* 34, no. 4, pp. 435–456, 2002.
- [43] C. O. Hwang, M. Mascagni, and J. A. Given, “A Feynman-Kac path-integral implementation for Poisson’s equation using an h-conditioned Green’s function,” *in* *Math. Comput. Simulation*, vol. 62, pp. 347–355, 2003.
- [44] N. Hyvönen, H. Hakula, and S. Pursiainen, “Numerical implementation of the factorization method within the complete electrode model of electrical impedance tomography,” *in* *Inverse Probl. Imaging*, vol. 1, pp. 299–317, 2007.
- [45] V. Isakov, *Inverse Problems for Partial Differential Equations*, 2nd ed., Applied Mathematical Sciences. Springer, 2005, vol. 127.
- [46] G. J. Jiang and J. L. Knight, “A nonparametric approach to the estimation of diffusion processes, with an application to a short-term interest rate model,” *in* *Econometric Theory*, vol. 13, 1997.
- [47] J. Jossinet, “The impedivity of freshly excised human breast tissue,” *in* *Physiological Measurement*, vol. 19, no. 1, p. 61, 1998.
- [48] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods. Vol. 1 : Basics*. New York, NY, USA : Wiley-Interscience, 1986.

- [49] I. Karatzas and S. E. Shreve, *Brownian Motion and Stochastic Calculus*, Graduate texts in mathematics. Springer-Verlag, 1991.
- [50] T. E. Kerner, K. D. Paulsen, A. Hartov, S. K. Soho, and S. P. Poplack, “Electrical impedance spectroscopy of the breast : clinical imaging results in 26 subjects,” in *IEEE Trans. Med. Imaging*, 2002.
- [51] R. Kulkarni, T.-J. Kao, G. Boverman, D. Isaacson, G. J. Saulnier, and J. C. Newell, “A two-layered forward model of tissue for electrical impedance tomography,” in *Physiological Measurement*, vol. 30, p. S19, 2009.
- [52] O. A. Ladyzenskaja, V. J. Rivkind, and N. N. Ural’ceve, “Solvability of diffraction problems in the classical sense,” in *Trudy Mat. Inst. Steklov.*, vol. 92, pp. 116–146, 1966.
- [53] B. Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis, *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*, Mathématiques et Applications. Springer Berlin Heidelberg, 1997.
- [54] P. Larraanaga and J. A. Lozano, *Estimation of Distribution Algorithms : A New Tool for Evolutionary Computation*. Norwell, MA, USA : Kluwer Academic Publishers, 2001.
- [55] P. L’Ecuyer, “Efficiency Improvement and Variance Reduction,” in *Proceedings of the 26th Conference on Winter Simulation*, WSC ’94, pp. 122–132, 1994.
- [56] A. Lejay and S. Maire, “Simulating diffusions with piecewise constant coefficients using a kinetic approximation,” in *Comput. Methods Appl. M.*, vol. 199, no. 29-32, pp. 2014–2023, 2010.
- [57] A. Lejay and S. Maire, “New Monte Carlo schemes for simulating diffusions in discontinuous media,” in *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 245, pp. 97–116, 2013.
- [58] A. Lejay and M. Martinez, “A scheme for simulating one-dimensional diffusion processes with discontinuous coefficients,” in *Ann. Appl. Probab.*, vol. 16, pp. 107–139, 2006.
- [59] A. Lejay, “Simulation of a stochastic process in a discontinuous layered medium,” in *Electron. Commun. Probab.*, vol. 16, pp. 764–774, 2011.
- [60] P. L. Lions and A. S. Sznitman, “Stochastic differential equations with reflecting boundary conditions,” in *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 37, no. 4, pp. 511–537, 1984.
- [61] y. . . M. Martinez, school = Université de Provence - Aix-Marseille I, “Stochastic interpretation of divergence form operators and associated probabilistic methods,” Ph.D. dissertation.
- [62] S. Maire and M. Simon, “A partially reflecting random walk on spheres algorithm for electrical impedance tomography,” accepted for publication in *Journal of Computational Physics*, 2015.
- [63] S. Maire and E. Tanré, “Some new simulations schemes for the evaluation of Feynman-Kac representations.” in *Monte Carlo Meth. and Appl.*, vol. 14, pp. 29–51, 2008.
- [64] S. Maire and E. Tanré, “Monte Carlo approximations of the Neumann problem.” in *Monte Carlo Meth. and Appl.*, vol. 19, pp. 201–236, 2013.
- [65] S. Maire, “Réduction de variance pour l’intégration numérique et pour le calcul critique en transport neutronique,” Ph.D. dissertation, Université de Toulon, 2001.

- [66] S. Maire and C. De Luigi, “Quasi-Monte Carlo quadratures for multivariate smooth functions.” *in* Appl. Numer. Math., vol. 56, pp. 146–162, 2006.
- [67] S. Maire and G. Nguyen, “Stochastic finite differences for elliptic diffusion equations in stratified domains,” accepted for publication in Mathematics and Computers in Simulation, 2015.
- [68] S. Maire and C. Prissette, “A restarted estimation of distribution algorithm for solving sudoku puzzles.” *in* Monte Carlo Meth. and Appl., vol. 18, pp. 147–160, 2012.
- [69] S. Maire and C. Prissette, “Collaborative evolution of population : A memetic algorithm for discrete and continuous optimization,” in prep.
- [70] T. D. Martinez, Miguel, “Discrétisation d’équations différentielles stochastiques unidimensionnelles à générateur sous forme divergence avec coefficient discontinu,” *in* Comptes rendus - Mathématique, vol. 342, pp. 51–56, 2006.
- [71] M. Mascagni and C. O. Hwang, “ ϵ -Shell error analysis for Walk On Spheres algorithms,” *in* Math. Comput. Simulation, vol. 63, no. 2, pp. 93 – 104, 2003.
- [72] M. Mascagni and N. A. Simonov, “Monte Carlo Methods for Calculating Some Physical Properties of Large Molecules,” *in* SIAM J. Sci. Comput., vol. 26, 2004.
- [73] Z. Michalewicz, *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs (2Nd, Extended Ed.)*. New York, NY, USA : Springer-Verlag New York, Inc., 1994.
- [74] Milstein and G. Noikhovich, *Stochastic numerics for mathematical physics*, Scientific computation. New York : Springer, 2010.
- [75] M. Motoo, “Some evaluations for continuous Monte Carlo method by using Brownian hitting process,” *in* Annals of the Institute of Statistical Mathematics, vol. 11, pp. 49–54, 1959.
- [76] H. Mühlenbein and G. Paass, “From Recombination of Genes to the Estimation of Distributions I. Binary Parameters,” *in* *Proceedings of the 4th International Conference on Parallel Problem Solving from Nature*, WSC ’94, pp. 178–187, 1996.
- [77] M. E. Muller, “Some continuous monte carlo methods for the dirichlet problem,” *in* Ann. Math. Stat., vol. 27, 1956.
- [78] F. Neri, C. Cotta, and P. Moscato, Eds., *Handbook of Memetic Algorithms*, Studies in Computational Intelligence. Springer, 2012, vol. 379.
- [79] H. Niederreiter, *Random Number Generation and quasi-Monte Carlo Methods*. Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1992.
- [80] G. Pages, “A space vector quantization for numerical integration,” *in* J. Comput. Appl. Math., vol. 89, pp. 1–38, 1997.
- [81] G. Pagès and J. Printems, “Functional quantization for numerics with an application to option pricing,” *in* Monte Carlo Methods and Appl., vol. 11, pp. 407–446, 2005.
- [82] M. K. Pidcock, M. Kuzuoglu, and K. Leblebicioglu, “Analytic and semi-analytic solutions in electrical impedance tomography. I. Two-dimensional problems,” *in* Physiological Measurement, vol. 16, no. 2, p. 77, 1995.

- [83] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN; The Art of Scientific Computing*, 2nd ed. New York, NY, USA : Cambridge University Press, 1993.
- [84] S. Pursiainen, “Two-stage reconstruction of a circular anomaly in electrical impedance tomography,” in *Inverse Problems*, vol. 22, no. 5, p. 1689, 2006.
- [85] K. K. Sabelfeld, *Monte Carlo methods in Boundary Value Problems*, Springer series in computational physics. Berlin : Springer, 1991.
- [86] G. Saporta, *Probabilités Analyse des Données et Statistique*. Editions Technip, 2011.
- [87] S. S. Sheu, “Continuity of Multidimensional Brownian Local Times,” in *Proceedings of the American Mathematical Society*, vol. 114, pp. 821–829, 1992.
- [88] M. Simon, “Anomaly Detection in Random Heterogeneous Media : Feynman-Kac Formulae, Stochastic Homogenization and Statistical Inversion,” Ph.D. dissertation, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 2014.
- [89] E. Somersalo, M. Cheney, and D. Isaacson, “Existence and Uniqueness for Electrode Models for Electric Current Computed Tomography,” in *SIAM J. Appl. Math.*, vol. 52, pp. 1023–1040, 1992.
- [90] D. Talay and L. Tubaro, “Expansions of the global error for numerical schemes solving stochastic differential equations,” in *Stoch. Anal. Appl.*, vol. 8, no. 4, pp. 94–120, 1990.
- [91] X. Thanh Vu, S. Maire, C. Chaux, and N. Thirion-Moreau, “A new stochastic optimization algorithm to decompose large nonnegative tensors,” in *IEEE Signal Processing Letters*, 2015.
- [92] E. C. Zachmanoglou and D. W. Thoe, *Introduction to Partial Differential Equations with Applications*, Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 1986.
- [93] M. Zhang, “Calculation of Diffusive Shock Acceleration of Charged Particles by Skew Brownian Motion,” in *The Astrophysical Journal*, vol. 541, p. 428, 2000.
- [94] Q. Zhang and H. Muhlenbein, “On the Convergence of a Class of Estimation of Distribution Algorithms,” in *Trans. Evol. Comp*, vol. 8, pp. 127–136, 2004.