

Bases probabilistes et formulation en chemins pour les méthodes de Monte Carlo de physique couplées

On suppose que le lecteur a suivi un cours consacré aux fondements des méthodes de Monte Carlo, par exemple celui de la fiche *Monte-Carlo introduction*. Les prérequis essentiels sont la probabilisation des équations intégrales, la notion de mesure d'importance, la construction d'estimateurs non biaisés et les principes de base de l'échantillonnage de chemins.

Il s'agit ici d'une mise en application de ces éléments de base en vue d'une formulation intégrale et probabiliste de modèles physiques couplés, en particulier dans des contextes de diffusion et de cavité brassée. On montre comment ces modèles peuvent être réunis dans un espace commun de chemins, apte à être exploré par des algorithmes de Monte Carlo.

Nous adoptons une démarche graduelle qui commence par l'analyse approfondie d'un phénomène fondamental : la diffusion. Sa maîtrise est cruciale : elle fournit l'exemple paradigmatique d'un système dont la solution se représente naturellement dans un espace de chemins aléatoires. On retrouve derrière cela les idées fondamentales de mouvement brownien, qui offrent une intuition solide sur la structure des processus stochastiques. C'est dans ce cadre que l'on comprend le mieux les mécanismes d'échantillonnage, de randomisation et de construction de chemins, mécanismes qui resteront au cœur de tous les algorithmes de Monte Carlo appliqués aux différentes physiques que nous aborderons ensuite.

Nous débutons ainsi par un problème diffusif stationnaire simple, assorti de conditions aux limites de type Dirichlet. Ce cadre épuré nous permettra d'introduire progressivement les mécanismes centraux de la probabilisation des équations elliptiques. Dans un second temps, nous considérerons une physique convective simplifiée, modélisée sous la forme d'une cavité brassée, également en régime stationnaire. Ces deux modèles, d'abord étudiés séparément, seront ensuite placés en interaction : nous décrirons alors la condition de raccord et la formulation probabiliste adaptée à leur couplage.

Une idée centrale émergera naturellement : la notion de *chemin thermique*. Selon le contexte physique, ces chemins pourront être :

- purement diffusifs (mouvements browniens) ;
- convectifs ;
- ou encore de type transport linéaire, comme en rayonnement thermique, physique des gaz dilués ou physique des plasmas.

L'unification au sein d'un *même espace de chemins* constitue le pivot conceptuel du cours : c'est cet espace que les algorithmes de Monte-Carlo devront échantillonner, et c'est lui qui permettra de traiter dans un même cadre formel des phénoménologies couplées a priori très différentes.

Tout au long du cours, plusieurs gestes fondamentaux seront mis en avant :

- la formulation intégrale et formelle des solutions, rendue possible par la linéarité des modèles considérés ;
- la probabilisation de ces représentations intégrales, cœur de la démarche Monte-Carlo ;
- l'usage systématique du principe de *double randomisation*, indispensable pour construire des algorithmes efficaces et adaptés à la structure des chemins thermiques.

Cette première partie du cours établit les bases théoriques, conceptuelles et probabilistes nécessaires pour construire, dans la suite, des méthodes de Monte Carlo capables de simuler, dans un cadre unifié, des phénomènes physiques couplés. Elle prépare l'étude de difficultés nouvelles : l'apparition de non-linéarités, l'impossibilité parfois de disposer de représentations probablisables explicites (comme dans certains problèmes issus de l'électromagnétisme où les noyaux itérés ne se prêtent pas à une reformulation probabiliste directe), ou encore la nécessité de concevoir des estimateurs non biaisés pour garantir la robustesse numérique des algorithmes.

Une autre partie du cours, que nous ne traiterons pas ici, sera consacrée aux bénéfices liés à la construction d'algorithmes de Monte Carlo dans un espace de chemins unifié. Parmi ces avantages, citons la capacité d'évaluer et de propager les erreurs ainsi que les sensibilités paramétriques de manière cohérente ; la possibilité d'introduire une nouvelle didactique permettant de comprendre et d'interpréter des phénomènes physiques couplés dans des géométries et des échelles temporelles exigeant un haut niveau de raffinement ; ou encore la mise au point de formulations de fonctions de transfert particulièrement efficaces sur le plan calculatoire.

1 La diffusion

Nous considérons dans un premier temps un problème diffusif stationnaire simple, décrit par l'équation de Poisson dans un domaine borné.

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un domaine ouvert, borné, régulier, muni de sa frontière $\partial\Omega$.

Nous considérons un milieu avec un coefficient de diffusion uniforme spatialement, noté $D > 0$, et soumis à une source volumique s non nécessairement uniforme. La fonction s est définie sur Ω et représente un taux de production (ou de disparition) de u par unité de temps ; son unité est donc celle de u par seconde.

On cherche une fonction

$$u : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$$

satisfaisant le problème aux limites stationnaire suivant :

$$\begin{cases} D \Delta u(\vec{x}) + s(\vec{x}) = 0, & \vec{x} \in \Omega, \\ u(\vec{x}) = g(\vec{x}), & \vec{x} \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (1)$$

où g est une fonction prescrite sur la frontière $\partial\Omega$ et décrit les conditions aux limites de Dirichlet.

Le problème (1) décrit donc sous forme différentielle l'état stationnaire d'un phénomène diffusif à coefficient homogène, soumis à une source volumique interne représentée par la fonction s . Celle-ci modélise la production ou la consommation locale de la grandeur u et intervient ici comme une fonction prescrite. La fonction inconnue u peut typiquement représenter :

- une densité de particules en régime stationnaire avec production ou absorption,
- un potentiel électrique en présence d'une densité volumique de charges,
- une concentration chimique alimentée ou consommée par des réactions internes,
- une température dans un milieu solide avec chauffage ou refroidissement local.

1.1 Représentation en propagateurs

La représentation intégrale d'une équation de diffusion stationnaire découle directement de la linéarité de l'opérateur considéré. En effet, le problème (1) est linéaire à la fois par rapport à la donnée de bord g et par rapport à la source volumique s . Il en résulte que la solution peut être obtenue comme la superposition de deux contributions indépendantes : l'une liée uniquement aux conditions limites posées sur $\partial\Omega$, l'autre liée à la présence de la source interne dans Ω .

Cette propriété fondamentale permet d'introduire des propagateurs, c'est-à-dire des noyaux intégraux décrivant comment une donnée appliquée en un point \vec{y} influence la valeur de la solution en un point intérieur \vec{x} . On obtient ainsi la représentation formelle :

$$u(\vec{x}) = \int_{\partial\Omega} \Phi_g(\vec{x}, \vec{y}) g(\vec{y}) d\vec{y} + \int_{\Omega} \Phi_s(\vec{x}, \vec{y}) s(\vec{y}) d\vec{y}, \quad \vec{x} \in \Omega. \quad (2)$$

Dans cette expression :

- $\Phi_g(\vec{x}, \vec{y})$ est le propagateur associé à la donnée de Dirichlet imposée sur la frontière $\partial\Omega$; il traduit la manière dont une valeur prescrite $g(\vec{y})$ se propage jusqu'au point intérieur \vec{x} ,
- $\Phi_s(\vec{x}, \vec{y})$ est le propagateur interne : il décrit comment l'effet d'une source localisée en \vec{y} se propage dans le domaine et contribue à la valeur de $u(\vec{x})$,
- la mesure $d\vec{y}$ désigne l'intégration sur la frontière dans la première intégrale et sur le domaine dans la seconde.

Cette décomposition met en évidence un principe fondamental : grâce à la linéarité, la solution s'obtient comme la somme d'effets élémentaires, chacun transporté depuis sa position d'origine par un propagateur adapté.

1.1.1 Fonction de Green et lien avec les propagateurs

Il existe de multiples façons d'écrire formellement les équations permettant d'obtenir une expression explicite ou implicite des propagateurs. Parmi les approches classiques figurent les méthodes basées sur les fonctions de Green, ainsi que l'écriture du modèle adjoint au modèle principal. Sans entrer dans le détail de ces dérivations, nous présentons ici, à titre informatif, la formulation de la fonction de Green associée au problème de diffusion considéré, ainsi que son lien direct avec les propagateurs Φ_g et Φ_s . Pour le lecteur intéressé par l'origine de la formule de représentation, une esquisse de démonstration, basée sur la seconde identité de Green, est proposée dans l'Encadré 1.1.1.

La fonction de Green $G(\vec{x}, \vec{y})$ du problème est définie comme la solution en \vec{x} du système suivant, pour une source ponctuelle située en \vec{y} :

$$\begin{cases} -D \Delta_{\vec{x}} G(\vec{x}, \vec{y}) = \delta(\vec{x} - \vec{y}), & \vec{x} \in \Omega, \\ G(\vec{x}, \vec{y}) = 0, & \vec{x} \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (3)$$

où δ désigne la distribution de Dirac. La fonction G représente la réponse élémentaire du système à une source infinitésimale, en tenant compte de la condition de Dirichlet imposée sur la frontière.

Les propagateurs introduits précédemment s'expriment alors naturellement en fonction de G . En particulier :

— le propagateur interne lié à la source s'écrit

$$\Phi_s(\vec{x}, \vec{y}) = G(\vec{x}, \vec{y});$$

— le propagateur associé à la donnée de frontière s'obtient par dérivation normale de la fonction de Green :

$$\Phi_g(\vec{x}, \vec{y}) = -D \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{y})}{\partial n_{\vec{y}}}, \quad \vec{y} \in \partial\Omega,$$

où $\partial/\partial n_{\vec{y}}$ désigne la dérivée suivant la normale sortante en \vec{y} .

Ainsi, la fonction de Green joue le rôle de construction fondamentale à partir de laquelle les différents propagateurs du modèle s'obtiennent directement, la linéarité de l'opérateur diffusif permettant de recomposer la solution sous forme intégrale.

Esquisse de démonstration de la formule de représentation

Rappel : seconde identité de Green. Pour deux fonctions suffisamment régulières u et v définies sur un domaine Ω , on a

$$\int_{\Omega} (u \Delta v - v \Delta u) \, d\vec{x} = \int_{\partial\Omega} \left(u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) \, d\vec{x}, \quad (4)$$

où $\partial/\partial n$ désigne la dérivée suivant la normale sortante à la frontière $\partial\Omega$. Cette identité résulte d'une intégration par parties et constitue l'ingrédient de base de la démonstration qui suit.

Pour simplifier la présentation, on suppose que le domaine Ω est suffisamment régulier et que les fonctions en jeu sont lisses. On considère la solution u du problème de diffusion stationnaire

$$\begin{cases} -D \Delta u(\vec{x}) = s(\vec{x}), & \vec{x} \in \Omega, \\ u(\vec{x}) = g(\vec{x}), & \vec{x} \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (5)$$

et la fonction de Green $G(\vec{x}, \vec{y})$ définie pour chaque $\vec{y} \in \Omega$ comme la solution, en variable \vec{x} , du problème

$$\begin{cases} -D \Delta_{\vec{x}} G(\vec{x}, \vec{y}) = \delta(\vec{x} - \vec{y}), & \vec{x} \in \Omega, \\ G(\vec{x}, \vec{y}) = 0, & \vec{x} \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (6)$$

On applique (4) à la paire de fonctions $u(\vec{x})$ et $v(\vec{x}) = G(\vec{x}, \vec{y})$, puis on intègre sur Ω par rapport à \vec{x} , ce qui conduit à

$$\int_{\Omega} \left(u(\vec{x}) \Delta_{\vec{x}} G(\vec{x}, \vec{y}) - G(\vec{x}, \vec{y}) \Delta u(\vec{x}) \right) d\vec{x} = \int_{\partial\Omega} \left(u(\vec{x}) \frac{\partial G}{\partial n_{\vec{x}}}(\vec{x}, \vec{y}) - G(\vec{x}, \vec{y}) \frac{\partial u}{\partial n_{\vec{x}}}(\vec{x}) \right) d\vec{x}. \quad (7)$$

En tenant compte des équations vérifiées par u et G , ainsi que des conditions de bord $G = 0$ sur $\partial\Omega$ et $u = g$ sur $\partial\Omega$, cette identité se réécrit, après simplifications, sous la forme

$$u(\vec{y}) = -D \int_{\partial\Omega} g(\vec{x}) \frac{\partial G}{\partial n_{\vec{x}}}(\vec{x}, \vec{y}) d\vec{x} + \int_{\Omega} G(\vec{x}, \vec{y}) s(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (8)$$

ce qui donne la formule de représentation annoncée. En identifiant avec l'écriture en propagateurs, on retrouve alors

$$\Phi_g(\vec{y}, \vec{x}) = -D \frac{\partial G}{\partial n_{\vec{x}}}(\vec{x}, \vec{y}), \quad \Phi_s(\vec{y}, \vec{x}) = G(\vec{x}, \vec{y}).$$

1.1.2 Une première forme de probabilisation de l'écriture en propagateur

La représentation en propagateur de la solution $u(\vec{x})$, obtenue à partir de l'équation (2), se prête naturellement à une reformulation probabiliste. Nous entendons par là qu'il est possible de réécrire cette forme intégrale de manière à l'interpréter comme l'espérance d'une variable aléatoire convenablement définie.

Avant d'introduire cette construction probabiliste, il est utile de rappeler une propriété clé du propagateur Φ_g dans le cas de la diffusion. Les propagateurs ne dépendent que de la géométrie du domaine et des paramètres physiques du milieu diffusif; ils sont donc indépendants des fonctions g et s . Il suffit alors d'examiner une situation simple pour en déduire une contrainte fondamentale.

Considérons le cas où la source interne s est nulle, et où la condition limite imposée sur la frontière est constante, c'est-à-dire $g(\vec{y}) = g^*$ pour tout $\vec{y} \in \partial\Omega$. Dans cette configuration, la solution du problème vérifie nécessairement $u(\vec{x}) = g^*$ pour tout $\vec{x} \in \Omega$. Ce résultat est parfois interprété, dans un cadre physique, comme une conséquence du second principe de la thermodynamique. Du point de vue mathématique, l'explication est plus simple. Le problème elliptique stationnaire ainsi posé est un *problème de Cauchy bien posé au sens de Hadamard*, c'est-à-dire qu'il admet une solution unique qui dépend continûment des données. Or la fonction constante $u(\vec{x}) = g^*$ satisfait à la fois l'équation différentielle et la condition de Dirichlet imposée sur la frontière. Dans le cadre de l'unicité, elle est donc nécessairement la solution du problème.

Cette remarque conduit naturellement à une propriété fondamentale du propagateur associé à la donnée de Dirichlet. En effet, puisque la solution constante $u(\vec{x}) = g^*$ satisfait l'équation lorsque $s = 0$, il doit en être de même de sa représentation intégrale. On en déduit que le propagateur Φ_g vérifie la condition de normalisation suivante :

$$\int_{\partial\Omega} \Phi_g(\vec{x}, \vec{y}) d\vec{y} = 1, \quad \text{pour tout } \vec{x} \in \Omega. \quad (9)$$

Cette propriété permet immédiatement une interprétation probabiliste de la contribution de bord. Pour un point intérieur fixé $\vec{x} \in \Omega$, la fonction

$$\vec{y} \longmapsto \Phi_g(\vec{x}, \vec{y}), \quad \vec{y} \in \partial\Omega,$$

est positive et intégrée à un. Elle peut donc être vue comme une densité de probabilité sur la frontière. Nous définissons une variable aléatoire

$$\vec{Y}_{\partial\Omega} \in \partial\Omega$$

de densité

$$p_{\vec{Y}_{\partial\Omega}}(\vec{y}; \vec{x}) = \Phi_g(\vec{x}, \vec{y}).$$

Avec cette définition, la contribution de bord dans (2) s'écrit naturellement

$$\int_{\partial\Omega} \Phi_g(\vec{x}, \vec{y}) g(\vec{y}) d\vec{y} = \mathbb{E}[g(\vec{Y}_{\partial\Omega})],$$

c'est-à-dire l'espérance de la donnée de Dirichlet évaluée en un point de la frontière, distribué selon la densité induite par le propagateur de Dirichlet.

Il n'existe en revanche pas de propriété équivalente pour le terme de source volumique. Contrairement à la contribution liée à la donnée de Dirichlet, le terme source ne se prête pas directement à une interprétation fondée sur un principe de maximum ou sur une pensée thermodynamique de type second principe. Nous ne détaillons pas ici cette différence de nature, mais soulignons qu'elle joue un rôle important dans la construction et la compréhension de la formulation probabiliste.

Pour reformuler l'intégrale volumique à son tour, nous introduisons une variable aléatoire

$$\vec{Y}_{\Omega} \in \Omega$$

de densité $p_{\vec{Y}_{\Omega}}(\vec{y})$ sur le domaine, avec

$$p_{\vec{Y}_{\Omega}}(\vec{y}) \geq 0, \quad \int_{\Omega} p_{\vec{Y}_{\Omega}}(\vec{y}) d\vec{y} = 1.$$

En insérant cette densité dans l'intégrale volumique, nous obtenons

$$\int_{\Omega} \Phi_s(\vec{x}, \vec{y}) s(\vec{y}) d\vec{y} = \mathbb{E} \left[\Phi_s(\vec{x}, \vec{Y}_{\Omega}) \frac{s(\vec{Y}_{\Omega})}{p_{\vec{Y}_{\Omega}}(\vec{Y}_{\Omega})} \right].$$

Au total, la solution $u(\vec{x})$ peut être écrite sous forme d'une seule espérance :

$$u(\vec{x}) = \mathbb{E} \left[g(\vec{Y}_{\partial\Omega}) + \Phi_s(\vec{x}, \vec{Y}_{\Omega}) \frac{s(\vec{Y}_{\Omega})}{p_{\vec{Y}_{\Omega}}(\vec{Y}_{\Omega})} \right]. \quad (10)$$

Cette écriture constitue un premier pont entre la formulation intégrale déterministe et une interprétation probabiliste, prête à être exploitée par des méthodes de Monte Carlo.

1.1.3 La récursivité et la double randomisation pour rendre possible l'échantillonnage

Nous arrivons ici à une seconde idée fondamentale, qui répond à une question très pratique : comment échantillonner effectivement les variables aléatoires $\vec{Y}_{\partial\Omega}$ et \vec{Y}_{Ω} , alors que, dans une géométrie complexe et en toute généralité, nous n'avons aucune expression explicite des propagateurs Φ_g et Φ_s ? Cette difficulté est universelle dès que l'on dépasse des cas simples ou des géométries canoniques. Or, elle doit être résolue si l'on veut construire une simulation de Monte Carlo réellement utilisable.

La réponse repose sur deux gestes essentiels qui, bien qu'étroitement liés, doivent être soigneusement distingués. Ils sont souvent amalgamés dans une même vision opérationnelle, mais il est utile, surtout dans un contexte pédagogique, de clarifier leurs rôles propres.

Le premier geste consiste à réécrire l'expression intégrale de la solution sous une forme récursive infinie, en exploitant la linéarité de l'équation. Autrement dit, la solution $u(\vec{x})$ est reformulée de manière à faire apparaître sa dépendance à elle-même, dans une structure qui renvoie chaque terme intégré à une copie locale du même problème. Cette écriture récursive est une pierre angulaire de l'échantillonnage, puisqu'elle remplace l'intégrale continue de départ par une succession d'étapes locales, chacune traduisant un morceau de la physique sous-jacente.

Le second geste est ce que nous avons introduit précédemment sous le nom de double randomisation. La double randomisation transforme chaque terme de l'écriture récursive en une espérance conditionnelle sur des succession de variables aléatoires choisie de façon à compenser l'absence de forme analytique des propagateurs du problème complet. Elle incarne le passage du calcul intégral au tirage aléatoire.

En combinant ces deux gestes, structure récursive et double randomisation, nous obtenons une méthode générale permettant d'échantillonner la solution sans jamais disposer d'expressions explicites pour les propagateurs Φ_g ou Φ_s . Cette approche, qui constitue l'un des fondements des méthodes de Monte Carlo modernes en physique, sera illustrée dans la suite et montre comment l'on peut simuler la diffusion en parcourant aléatoirement un espace de chemins.

Pour comprendre concrètement comment cette stratégie se met en œuvre, nous allons maintenant localiser l'écriture intégrale autour d'un point intérieur $\vec{x} \in \Omega$. Plutôt que de travailler sur le domaine complet Ω et sa frontière globale $\partial\Omega$, nous considérons une sphère $\partial B(\vec{x}, R)$ de centre \vec{x} et de rayon R , entièrement incluse dans Ω . Ce choix, purement géométrique, nous permet d'exploiter le fait que les propagateurs associés à une telle sphère sont connus de manière explicite. Ces expressions, essentielles pour initier la construction récursive, sont rassemblées dans l'encadré ci-dessous (Propagateurs explicites dans une boule centrée en \vec{x}).

Sur la sphère $\partial B(\vec{x}, R)$ et dans la boule $B(\vec{x}, R)$, nous introduisons les variables aléatoires :

$$\vec{Y}_{\partial B} \in \partial B(\vec{x}, R) \quad \text{et} \quad \vec{Y}_B \in B(\vec{x}, R)$$

avec leurs densités associées :

$$p_{\vec{Y}_{\partial B}}(\vec{y}) \quad \text{et} \quad p_{\vec{Y}_B}(\vec{y}).$$

La solution locale $u(\vec{x})$ peut alors être réécrite exclusivement à partir de cette géométrie locale, selon :

$$u(\vec{x}) = \mathbb{E} \left[u(\vec{Y}_{\partial B}) + \Phi_s^B(\vec{x}, \vec{Y}_B) \frac{s(\vec{Y}_B)}{p_{\vec{Y}_B}(\vec{Y}_B)} \right]. \quad (11)$$

Le terme $u(\vec{Y}_{\partial B})$ représente la valeur de la solution sur la sphère locale, tandis que le second terme encode la contribution volumique de la source dans la boule. L'intérêt de cette formule est qu'elle exprime $u(\vec{x})$ en fonction de valeurs de u dans un voisinage restreint, ce qui rend possible une construction récursive.

Mise en place de la récursion locale. La relation (11) peut être interprétée comme une étape élémentaire d'un processus récursif plus large : la valeur de u en un point \vec{x} dépend de la valeur de u sur la sphère $\partial B(\vec{x}, R)$, où elle est à nouveau exprimée à l'aide de la même formule. Autrement dit, pour un tirage donné de $\vec{Y}_{\partial B}$, on peut appliquer à nouveau (11), en remplaçant \vec{x} par $\vec{Y}_{\partial B}$, et en reconstruisant une nouvelle boule autour de ce point — dès lors qu'elle est toujours incluse dans Ω .

Cette démarche conduit à une structure récursive potentiellement infinie, qui ne s'arrête que lorsque la trajectoire quitte le domaine. Pour rendre cette construction explicite, introduisons une suite de points aléatoires $(\vec{X}_n)_{n \geq 0}$ définie par :

$$\vec{X}_0 = \vec{x}, \quad \vec{X}_{n+1} \in \partial B(\vec{X}_n, R_n),$$

où chaque \vec{X}_{n+1} est tiré selon la densité associée au propagateur Φ_g^B sur la sphère $\partial B(\vec{X}_n, R_n)$. Les rayons R_n sont choisis de sorte que les boules $B(\vec{X}_n, R_n)$ soient toutes contenues dans Ω .

À chaque étape, une contribution locale liée à la source est également tirée. Pour cela, on introduit une variable indépendante $\vec{Y}_B^{(n)}$ avec densité $p_{\vec{Y}_B}$ dans la boule $B(\vec{X}_n, R_n)$, et on définit :

$$W_n = \Phi_s^B(\vec{X}_n, \vec{Y}_B^{(n)}) \frac{s(\vec{Y}_B^{(n)})}{p_{\vec{Y}_B}(\vec{Y}_B^{(n)})}.$$

La relation (11) appliquée successivement devient alors, pour tout n :

$$u(\vec{X}_n) = \mathbb{E}[u(\vec{X}_{n+1}) + W_n]. \quad (12)$$

Cette relation récursive se poursuit tant que le point \vec{X}_n reste intérieur au domaine Ω . Pour formaliser cet arrêt, nous introduisons une variable aléatoire discrète

$$N = \inf\{n \geq 0 \mid \vec{X}_n \in \partial\Omega\},$$

qui représente le nombre de sauts effectués avant que le chemin atteigne la frontière. Dès que $\vec{X}_N \in \partial\Omega$, la valeur de u est imposée par la condition de Dirichlet : $u(\vec{X}_N) = g(\vec{X}_N)$.

En itérant la relation (12) jusqu'à l'étape N , nous obtenons alors la représentation probabiliste suivante de la solution :

$$u(\vec{x}) = \mathbb{E}\left[g(\vec{X}_N) + \sum_{n=0}^{N-1} W_n\right]. \quad (13)$$

Cette expression constitue une vision en chemin thermique : la solution en \vec{x} est donnée par l'espérance d'une contribution de bord (lorsque la trajectoire atteint la frontière globale), plus la somme des contributions de source accumulées le long du chemin thermique :

$$\vec{X}_0, \vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_N.$$

La figure 1 illustre concrètement cette construction en chemin : à partir d'un point de départ \vec{x}_0 , on trace successivement des sphères inscrites dans le domaine et l'on choisit un point aléatoirement sur chacune de leurs surfaces pour amorcer un nouveau saut, jusqu'à atteindre la frontière. Ce procédé est au cœur de la récursion mise en place pour simuler la diffusion par échantillonnage de chemins.

Remarques sur la mise en œuvre pratique : WOS et WOδS. Une difficulté pratique majeure apparaît lorsqu'on souhaite mettre en œuvre l'échantillonnage décrit précédemment : en pratique, il n'est jamais possible d'échantillonner directement un point de la frontière $\partial\Omega$. En effet, lorsque la sphère inscrite $B(\vec{x}, R)$ est tangentielle à la frontière, la probabilité d'atteindre exactement un point du bord est nulle. Il devient alors nécessaire de recourir à des stratégies d'approximation pour gérer l'arrivée à la frontière.

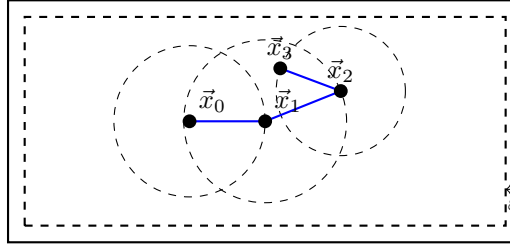


FIGURE 1 – Illustration de la progression du chemin thermique par sauts successifs sur sphères.

Deux grandes approches sont couramment utilisées : *Walk on Spheres (WOS)* et *Walk on δ -Spheres (WO δ S)*. Bien qu'ayant le même objectif, ces méthodes sont de nature différente.

La méthode Walk on Spheres (WOS). Dans WOS, on choisit à chaque étape la plus grande sphère inscrite centrée en \vec{x}_n , c'est-à-dire tangentielle à $\partial\Omega$. Pour rendre possible l'arrivée sur la frontière (qui est un événement de probabilité nulle en mesure sous la sphère), on introduit un paramètre $\varepsilon > 0$: dès que la distance à la frontière devient inférieure à ε , le processus est arrêté et la trajectoire est considérée comme ayant atteint le bord.

Cette méthode, bien que reposant sur une approximation géométrique, possède une propriété remarquable : le nombre moyen de sauts nécessaires pour atteindre la frontière croît de manière logarithmique avec $1/\varepsilon$. Autrement dit, pour un ε extrêmement petit (jusqu'à l'ordre de la précision machine), le nombre d'étapes reste très faible. Cela permet en pratique d'utiliser un ε arbitrairement petit sans introduire de biais significatif dans l'estimateur tout en conservant un coût de calcul maîtrisé.

La méthode Walk on δ -Spheres (WO δ S). À l'inverse, dans la méthode WO δ S, on utilise à chaque étape une sphère de rayon fixé δ , choisi petit devant les dimensions du domaine. La marche progresse ainsi par sauts réguliers, indépendamment de la géométrie locale. Lorsque la sphère intercepte la frontière, différents schémas d'approximation peuvent être utilisés pour approcher le point d'impact ; nous ne les détaillons pas ici.

Cette approche présente plusieurs avantages :

- *Sur le plan physique*, elle permet naturellement de traiter des milieux dont les propriétés thermophysiques ne sont pas uniformes (par exemple si le coefficient de diffusion varie dans le domaine), cas où la méthode WOS n'est plus applicable car les trajectoires ne sont plus isotropes.
- *Sur le plan algorithmique*, les opérations géométriques requises ne sont pas les mêmes. WOS nécessite à chaque étape une recherche de distance minimale à la paroi pour déterminer le rayon de la plus grande sphère inscrite dans la géométrie. WO δ S repose quant à elle sur de simples opérations d'intersection de rayon avec la géométrie de la scène, ce qui est une requête standard dans les moteurs de rendu 3D.

En résumé, WOS permet d'obtenir un estimateur non biaisé de la solution, même en l'absence de connaissance explicite des propagateurs, grâce à l'introduction contrôlée du paramètre ε . La méthode WO δ S, quant à elle, offre une flexibilité importante dès lors que les propriétés du milieu ne sont pas uniformes, mais introduit systématiquement un biais lié au paramètre numérique δ . Bien que leurs principes diffèrent, ces deux approches reposent sur le même cadre probabiliste.

Propagateurs explicites dans une boule centrée en \vec{x}

Considérons une boule $B(\vec{x}, R)$ de centre \vec{x} et de rayon R , telle que $B(\vec{x}, R) \subset \Omega$, et le problème local stationnaire :

$$-D \Delta u(\vec{z}) = s(\vec{z}), \quad \vec{z} \in B(\vec{x}, R), \quad u(\vec{z}) = g(\vec{z}), \quad \vec{z} \in \partial B(\vec{x}, R).$$

En dimension $d = 3$, le propagateur associé à la donnée de bord sur la sphère $\partial B(\vec{x}, R)$ est uniforme :

$$\Phi_g^B(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{4\pi R^2}, \quad \vec{y} \in \partial B(\vec{x}, R).$$

Il satisfait bien la normalisation :

$$\int_{\partial B(\vec{x}, R)} \Phi_g^B(\vec{x}, \vec{y}) d\vec{y} = 1.$$

Pour le terme volumique, le propagateur est donné par la fonction de Green associée à la boule :

$$\Phi_s^B(\vec{x}, \vec{y}) = G_B(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{4\pi D} \left(\frac{1}{\|\vec{y} - \vec{x}\|} - \frac{1}{R} \right), \quad \vec{y} \in B(\vec{x}, R).$$

En dimension $d = 2$, les expressions correspondantes sont :

$$\Phi_g^B(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi R}, \quad \Phi_s^B(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi D} \ln \left(\frac{R}{\|\vec{y} - \vec{x}\|} \right).$$

Ces expressions explicites sont essentielles pour construire des schémas d'échantillonnage local et initier une écriture récursive de la solution.

1.1.4 Lien avec la représentation de Feynman–Kac

Dans la formulation en propagateur, la contribution de frontière dans la solution $u(\vec{x})$ s'écrit

$$\int_{\partial\Omega} \Phi_g(\vec{x}, \vec{y}) g(\vec{y}) d\vec{y},$$

où $\Phi_g(\vec{x}, \vec{y})$ est un noyau normalisé sur la frontière $\partial\Omega$, que nous avons interprété comme une densité de probabilité pour un point aléatoire situé sur le bord. Nous allons maintenant montrer comment une telle densité apparaît naturellement lorsqu'on représente la solution à l'aide d'un mouvement Brownien.

Considérons un mouvement Brownien $(\vec{B}_t)_{t \geq 0}$ partant de $\vec{x} \in \Omega$, et définissons le *temps de premier passage à la frontière* :

$$T = \inf\{t \geq 0 \mid \vec{B}_t \in \partial\Omega\}.$$

À l'instant aléatoire T , le mouvement atteint un point de la frontière, noté $\vec{B}_T \in \partial\Omega$. Si l'on appelle $p_{\text{exit}}(\vec{y}; \vec{x})$ la densité de probabilité que le mouvement Brownien parti de \vec{x} atteigne la frontière en \vec{y} , alors, par définition,

$$\mathbb{E}[g(\vec{B}_T)] = \int_{\partial\Omega} g(\vec{y}) p_{\text{exit}}(\vec{y}; \vec{x}) d\vec{y}.$$

En comparant cette expression avec celle du propagateur, on voit que

$$\Phi_g(\vec{x}, \vec{y}) = p_{\text{exit}}(\vec{y}; \vec{x}).$$

Ainsi, le propagateur de Dirichlet Φ_g n'est rien d'autre que la densité de probabilité décrivant où un mouvement Brownien parti de \vec{x} sortira finalement du domaine. Cette densité inclut, de manière implicite, toute la complexité temporelle des trajectoires Browniennes, mais seul le point d'impact sur la frontière intervient dans l'écriture de la solution.

Et le terme source ? La représentation de Feynman–Kac contient également un second terme, qui correspond à la contribution de la source volumique :

$$\mathbb{E} \left[\int_0^T \frac{s(\vec{B}_t)}{D} dt \right].$$

Ce terme prend explicitement en compte le passage du temps avant d'atteindre la frontière : chaque trajectoire Brownienne accumule une contribution continue, proportionnelle à la source s , tout au long de son parcours dans le domaine jusqu'à son absorption.

Cette intégrale est l'analogie temporelle de la contribution volumique dans la formulation en propagateur :

$$\int_{\Omega} \Phi_s(\vec{x}, \vec{y}) s(\vec{y}) d\vec{y},$$

dans laquelle $\Phi_s(\vec{x}, \vec{y})$ s'interprète comme le temps moyen passé en \vec{y} par le mouvement Brownien avant absorption. Ainsi, la structure intégrale sur le temps dans la formule de Feynman–Kac correspond naturellement à une intégration spatiale pondérée par le propagateur Φ_s .

Cette lecture unifiée de la contribution de bord et de volume montre que les formulations par propagateur et par mouvement Brownien ne sont pas seulement liées conceptuellement : elles décrivent rigoureusement la même solution, chacune mettant en avant un mécanisme différent, l'une basé sur des noyaux intégrables, l'autre sur des trajectoires stochastiques et le temps de premier passage.

2 Modélisation d'une cavité brassée

La section précédente était consacrée à la modélisation d'un processus purement diffusif dans un domaine Ω_{diff} , traité de manière locale à l'aide de propagateurs ou de formulations intégrales. Nous introduisons à présent une classe de modèles d'un tout autre type : des zones homogènes, appelées ici *cavités brassées*. L'objectif n'est pas de les traiter isolément, mais bien de préparer un couplage entre différentes physiques, dans le même esprit que celui qui présidera à la construction d'un espace de chemins unique pour des algorithmes de Monte Carlo couplés.

Dans ce cadre, le principe fondamental du couplage entre un milieu diffusif et une cavité brassée reposerait, en général, sur deux lois de raccord :

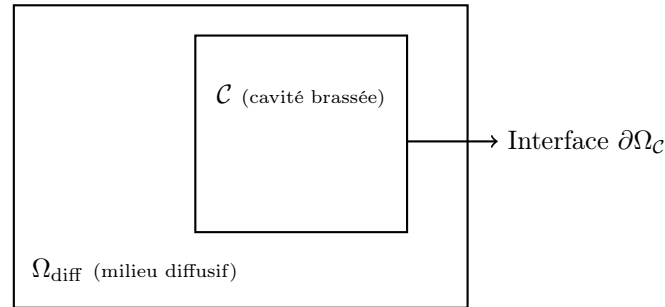
- la **continuité de la valeur** de la grandeur physique (température, concentration, potentiel, etc.) à la frontière entre les deux domaines ;
- la **continuité du flux**, assurant que ce qui est perdu par l'un est gagné par l'autre.

Ces deux conditions permettent d'assurer le couplage de manière cohérente et, comme nous le verrons, de le traduire dans une interprétation probabiliste commune dans un même espace de chemins.

Pour éviter toute ambiguïté avec les notations précédentes, nous distinguons dans ce qui suit :

- le domaine de diffusion, noté Ω_{diff} ;
- la cavité homogène, notée \mathcal{C} , supposée fermée et incluse dans un domaine plus large $\tilde{\Omega}$.

L'interface entre ces deux sous-domaines est notée $\partial\Omega_{\mathcal{C}}$.



2.1 Modèle de cavité brassée et ses applications

La cavité brassée \mathcal{C} est supposée *parfaitement homogène*, au sens où une seule variable scalaire suffit à décrire l'état physique qui s'y trouve. Ce type de modèle est très fréquent en ingénierie, en modélisation multi-échelle, ou encore dans les approches de type hybride. Nous donnons ci-dessous quelques exemples d'application typiques :

- **Thermique avec convection dominante.** Un volume de fluide brassé par des courants convectifs intenses peut être considéré comme isotherme : la température interne ne dépend que du bilan des flux parois.
- **Réacteur chimique parfaitement agité (modèle CSTR).** Dans le cas où le brassage est suffisamment fort, la composition d'un réacteur chimique est homogène et évolue en fonction de flux d'entrée et de sortie connectés à sa surface.
- **Chambre de pyrolyse ou de gazéification homogénéisée.** Lorsqu'un matériau décompose ou se transforme à température élevée dans un volume confiné sans gradient interne, la quantité de matière évolue uniquement selon des bilans de flux à la frontière.
- **Modèle compartimental en pharmacocinétique.** Les organes (par ex. le cœur ou le foie) sont parfois décrits comme des volumes homogènes, dans lesquels la concentration d'un médicament varie en fonction de flux entrant (absorption) et sortant (élimination).
- **Zone de stockage énergétique homogène.** Dans une cellule électrochimique ou un réservoir thermique bien isolé, le stockage (en énergie ou en masse) peut se modéliser sans variations internes, uniquement par flux aux frontières.

2.2 Formulation probabiliste du modèle.

Avant d'aborder la reformulation probabiliste du modèle de cavité brassée, il est important de préciser que nous nous plaçons ici dans une situation où les grandeurs physiques en jeu sont de même nature. Autrement dit, la fonction $u(\vec{x})$ définie dans le domaine diffusif et la variable $v(t)$ dans la cavité brassée représentent la même variable d'intérêt (par exemple une température, une concentration, une énergie volumique, etc.). Ce choix garantit la cohérence des échanges entre les deux régions et rend possible une lecture probabiliste commune, que nous exploiterons ensuite pour construire un espace de chemins unifié.

Le modèle de cavité brassée, bien qu'homogène, reste un système dynamique régi par une équation différentielle d'évolution. Cette équation de bilan exprime que la variation temporelle de l'état interne $v(t)$ est uniquement due aux échanges à la frontière :

$$\frac{dv}{dt} = - \int_{\partial\Omega_{\mathcal{C}}} \alpha(\vec{y}) [v(t) - g_v(\vec{y})] d\vec{y}. \quad (14)$$

Cette équation est une loi de conservation : le terme entre crochets représente l'écart entre la valeur interne et la valeur externe imposée sur la frontière, pondéré par la capacité locale d'échange $\alpha(\vec{y})$. On peut l'interpréter comme une somme continue des flux en chaque point de sa frontière.

En régime stationnaire, le système atteint un état tel que $\frac{dv}{dt} = 0$. L'équation (14) devient alors :

$$\int_{\partial\Omega_C} \alpha(\vec{y}) [v_{\text{stat}} - g_v(\vec{y})] d\vec{y} = 0. \quad (15)$$

Ce qui conduit immédiatement à l'expression explicite :

$$v_{\text{stat}} = \frac{\int_{\partial\Omega_C} \alpha(\vec{y}) g_v(\vec{y}) d\vec{y}}{\int_{\partial\Omega_C} \alpha(\vec{y}) d\vec{y}}.$$

Cette écriture comporte une structure caractéristique de moyenne pondérée sur la frontière $\partial\Omega_C$, dans laquelle $\alpha(\vec{y})$ joue le rôle d'un poids local. Cette observation suggère alors une reformulation probabiliste de la solution, analogue à celle introduite pour la diffusion, mais ici rendue particulièrement transparente par l'absence de dépendance spatiale intérieure : il n'y a ni gradient interne, ni source volumique.

Pour formaliser cette interprétation, nous introduisons la constante de normalisation

$$A = \int_{\partial\Omega_C} \alpha(\vec{y}) d\vec{y},$$

puis nous définissons la densité de probabilité

$$p_{\vec{Y}_{\partial C}}(\vec{y}) = \frac{\alpha(\vec{y})}{A}, \quad \vec{y} \in \partial\Omega_C.$$

Ainsi, la variable aléatoire

$$\vec{Y}_{\partial C} \in \partial\Omega_C$$

de densité $p_{\vec{Y}_{\partial C}}$ permet d'écrire la solution stationnaire sous la forme :

$$v_{\text{stat}} = \mathbb{E} [g(\vec{Y}_{\partial C})]. \quad (16)$$

Cette reformulation probabiliste apporte deux éclairages majeurs :

- elle met explicitement en évidence le lien entre dynamiques internes et échanges en frontière, en montrant que la solution stationnaire peut être obtenue par un simple échantillonnage aléatoire ;
- elle installe un langage commun avec les formulations intégrales diffusives vues précédemment : dans les deux cas, la solution est évaluée sous forme d'espérance d'une fonction évaluée en un point aléatoire dont la densité encode la physique du problème.

3 Conditions de raccord et formulation probabiliste du couplage

Les deux modèles présentés précédemment, la diffusion dans Ω_{diff} et la cavité brassée englobée, ont été formulés comme si la donnée sur la frontière $\partial\Omega_C$ était connue à l'avance. Or, dans le cas du couplage qui nous intéresse ici, ce n'est précisément pas le cas : la frontière de la cavité est un lieu d'échange entre deux régions régies par des lois physiques distinctes, et la valeur de la grandeur sur cette interface est a priori inconnue.

Pour fermer le problème global et décrire le couplage physique entre diffusion et cavité brassée, il est nécessaire d'introduire une condition de raccord sur la surface $\partial\Omega_C$. Cette loi de raccord repose sur deux conditions fondamentales :

1. **Continuité de la grandeur d'intérêt** : la variable (température, concentration, énergie, etc.) est supposée continue à l'interface. Autrement dit, sur chaque point $\vec{y} \in \partial\Omega_C$, on impose :

$$g(\vec{y}) = g_v(\vec{y})$$

2. **Continuité du flux** : le flux diffusif traversant la frontière du côté du domaine diffusif est égal au flux d'échange convectif du côté de la cavité. Si l'on note \vec{n} la normale sortante du domaine diffusif, alors (étant donnée la première condition) :

$$-D \nabla u(\vec{y}) \cdot \vec{n} = \alpha(\vec{y}) [u(\vec{y}) - v_{\text{stat}}], \quad \vec{y} \in \partial\Omega_C. \quad (17)$$

Cette dernière condition décrit physiquement que le flux diffusif sortant du domaine est égal au flux d'échange proportionnel à l'écart entre l'intérieur de la cavité (v) et la valeur à l'interface (u), pondéré par le coefficient local d'échange $\alpha(\vec{y})$.

3.1 Vers une formulation probabiliste du raccord

Ces conditions de raccord, bien qu'écrites sous forme locale, doivent être intégrées dans une formulation probabiliste permettant l'échantillonnage des trajectoires issues de la diffusion et de la cavité brassée dans un espace commun, l'espace de chemins que nous cherchons à définir.

Les expressions des solutions $u(\vec{x})$ et v_{stat} sont combinées à l'aide des conditions (17) afin de reformuler $u(\vec{y})$ en une quantité auto-cohérente, dépendant à la fois des contributions diffusives et de l'état de la cavité. Cependant, ce passage n'est pas entièrement exact : la probabilisation nécessite en général une approximation sur la forme locale du gradient $\nabla u(\vec{y})$ au voisinage de la frontière. Cette approximation est acceptable dans un cadre Monte Carlo dès lors que la représentation des chemins est construite de manière suffisamment fine pour rendre négligeable le biais associé. Cette question, que nous ne détaillons pas ici, joue un rôle essentiel dans la construction d'estimateurs non biaisés ou asymptotiquement exacts.

3.1.1 Approximation locale du flux diffusif

La condition de flux (17) impose une égalité entre la dérivée normale du champ diffusif u et le flux d'échange proportionnel à l'écart $u - v$. Or, dans un contexte de simulation par chemins aléatoires, l'évaluation précise du gradient normal $\nabla u(\vec{y}) \cdot \vec{n}$ à la frontière représente une difficulté majeure.

Nous allons donc, par exemple (mais il existe d'autres possibilités), approcher le terme $\nabla u(\vec{y}) \cdot \vec{n}$ par une différence finie en introduisant une distance de discrétisation δ dans la direction normale à la paroi. Rappelons ici que \vec{n} désigne la normale sortante du domaine diffusif. La dérivée normale peut alors être approchée par :

$$\nabla u(\vec{y}) \cdot \vec{n} \approx \frac{u(\vec{y}) - u(\vec{y} - \delta \vec{n})}{\delta},$$

c'est-à-dire une variation entre la valeur au point de la paroi et celle au point situé à une distance δ vers l'intérieur du domaine diffusif ($\vec{y} - \delta \vec{n}$).

En insérant cette approximation dans la condition de flux (17), on obtient :

$$-D \frac{u(\vec{y}) - u(\vec{y} - \delta \vec{n})}{\delta} = \alpha(\vec{y}) [u(\vec{y}) - v_{\text{stat}}]. \quad (18)$$

En réorganisant cette expression, on en déduit une relation approchée entre la valeur du champ diffusif au point de la frontière \vec{y} et au point intérieur $\vec{y} - \delta \vec{n}$:

$$u(\vec{y}) = \frac{D}{D + \alpha(\vec{y}) \delta} u(\vec{y} - \delta \vec{n}) + \frac{\alpha(\vec{y}) \delta}{D + \alpha(\vec{y}) \delta} v_{\text{stat}}$$

Cette équation exprime que la valeur du champ diffusif u au point de l'interface est une moyenne pondérée entre la valeur de u à une distance δ vers l'intérieur du domaine et l'état v_{stat} de la cavité. Le rapport des poids fait intervenir le coefficient de diffusion D , le coefficient d'échange $\alpha(\vec{y})$ et le paramètre numérique δ .

Du point de vue probabiliste, cette relation suggère une dynamique simple au voisinage de la frontière : lorsqu'un chemin diffusif atteint la paroi de la cavité, il peut, avec une probabilité bien définie, soit continuer sa marche à l'intérieur du domaine diffusif, soit interagir avec la cavité en contribuant au terme de relaxation. En termes stochastiques, cela correspond à un processus de "sauts aléatoires en frontière", où les probabilités de transition sont déterminées par les poids de la relation précédente.

Glossaire

This document is incomplete. The external file associated with the glossary ‘main’ (which should be called `fiche_espaces_de_chemins_introduction.gls`) hasn’t been created.

Check the contents of the file `fiche_espaces_de_chemins_introduction.glo`. If it’s empty, that means you haven’t indexed any of your entries in this glossary (using commands like `\gls` or `\glsadd`) so this list can’t be generated. If the file isn’t empty, the document build process hasn’t been completed.

If you don’t want this glossary, add `nomain` to your package option list when you load `glossaries-extra.sty`. For example:

```
\usepackage[nomain]{glossaries-extra}
```

Try one of the following:

— Add `automake` to your package option list when you load `glossaries-extra.sty`. For example:

```
\usepackage[automake]{glossaries-extra}
```

— Run the external (Lua) application:

```
makeglossaries-lite.lua "fiche_espaces_de_chemins_introduction"
```

— Run the external (Perl) application:

```
makeglossaries "fiche_espaces_de_chemins_introduction"
```

Then rerun \LaTeX on this document.

This message will be removed once the problem has been fixed.

Acronymes

This document is incomplete. The external file associated with the glossary ‘acronym’ (which should be called `fiche_espaces_de_chemins_introduction.acr`) hasn’t been created.

This has probably happened because there are no entries defined in this glossary. Did you forget to use `type=acronym` when you defined your entries? If you tried to load entries into this glossary with `\loadglsentries` did you remember to use `[acronym]` as the optional argument? If you did, check that the definitions in the file you loaded all had the type set to `\glsdefaulttype`.

This message will be removed once the problem has been fixed.

Symboles

This document is incomplete. The external file associated with the glossary ‘symbols’ (which should be called `fiche_espaces_de_chemins_introduction.sls`) hasn’t been created.

Check the contents of the file `fiche_espaces_de_chemins_introduction.slo`. If it’s empty, that means you haven’t indexed any of your entries in this glossary (using commands like `\gls` or `\glsadd`) so this list can’t be generated. If the file isn’t empty, the document build process hasn’t been completed.

Try one of the following:

— Add `automake` to your package option list when you load `glossaries-extra.sty`. For example:

```
\usepackage[automake]{glossaries-extra}
```

- Run the external (Lua) application:
`makeglossaries-lite.lua "fiche_espaces_de_chemin_introduction"`
- Run the external (Perl) application:
`makeglossaries "fiche_espaces_de_chemin_introduction"`

Then rerun \LaTeX on this document.

This message will be removed once the problem has been fixed.