



HAL
open science

Thermique non-linéaire et Monte-Carlo

Jean-Marc Tregan

► **To cite this version:**

Jean-Marc Tregan. Thermique non-linéaire et Monte-Carlo. Thermique [physics.class-ph]. Université Toulouse 3 Paul Sabatier, 2020. Français. NNT : . tel-03266863

HAL Id: tel-03266863

<https://hal.science/tel-03266863v1>

Submitted on 25 Jun 2021

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.

THÈSE

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE
Délivré par l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

Présentée et soutenue par
Jean-marc TREGAN

Le 4 décembre 2020

Thermique non-linéaire et Monte Carlo

Ecole doctorale : **MEGEP - Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés**

Spécialité : **Energétique et transferts**

Unité de recherche :

LAPLACE - Laboratoire PLASma et Conversion d'Énergie - CNRS-UPS-INPT

Thèse dirigée par

Richard FOURNIER et Stephane BLANCO

Jury

M. Gilles Parent, Rapporteur

M. Sylvain Maire, Rapporteur

M. Remi Carminati, Examineur

M. Rodolphe Vaillon, Examineur

Mme Isabelle Rupp, Examinatrice

M. Richard FOURNIER, Directeur de thèse

M. Stephane Blanco, Co-directeur de thèse

Table des matières

1	Problématique	6
1.1	Contexte et problématique	6
1.2	Plan du document	15
2	Introduction à la méthode de Monte-Carlo	18
2.1	La méthode de Monte-Carlo	18
2.1.1	Principe de la méthode de Monte-Carlo	19
2.1.1.1	Choix d'une formulation intégrale	19
2.1.1.2	L'algorithme de Monte-Carlo	20
2.1.1.3	Convergence et loi des grands nombres	20
2.1.1.4	Reformulation d'une observable déterministe en une observable probabiliste	22
2.1.2	Estimation de l'erreur statistique	24
2.1.2.1	Construction de l'intervalle de confiance	24
2.1.2.2	Echantillonnage de l'intervalle de confiance	25
2.1.3	Technique de réduction de variance	26
2.1.4	Double randomisation	27
2.1.5	Exemple de mise en oeuvre de la double randomisation	28
2.1.6	Sensibilités et Monte-Carlo	29
2.2	Monte-Carlo Non-Linéaire	31
2.2.1	Définition de Monte-Carlo Linéaire (MCL)	31
2.2.2	Définition de Monte-Carlo Non-linéaire (MCNL)	32
2.3	Conclusion	33
3	Thermique linéaire	35
3.1	Description des différents transferts de chaleur	36
3.1.1	Rayonnement	40
3.1.2	Conduction	41
3.1.3	Convection	42
3.1.4	Modèle conducto-convecto-radiatif	42
3.2	Méthode des fonctions de Green	44
3.2.1	Introduction aux fonctions de Green	44
3.2.1.1	Description du système différentiel linéaire	44
3.2.1.2	Fonction de Green	45
3.2.1.3	Méthode de Green et Monte-Carlo	46
3.2.1.4	Mise en oeuvre de la Méthode de Green	48
3.2.2	Méthode de Green et Transfert Thermique Linéaire	49

3.2.2.1	Fonction de Green pour la Convection dans le fluide Ω_F . . .	50
3.2.2.2	Fonction de Green pour la Conduction dans le solide Ω_S . . .	53
3.2.2.3	Techniques d'échantillonnage des contributions conductives .	58
3.2.2.4	Fonction de Green pour le Rayonnement	62
3.2.2.5	Techniques d'échantillonnage des contributions radiatives . .	66
3.2.3	Méthode de Green et Couplages	68
3.3	Processus Stochastiques	72
3.3.1	Introduction aux Processus Stochastiques	72
3.3.2	Transfert conductif et processus stochastique	73
3.3.2.1	Conduction en milieu infini	73
3.3.2.2	Lien entre Processus Stochastique et méthode de Green . .	76
3.3.2.3	Prise en compte des frontières et couplage conducto-convecto- radiatif	77
3.3.2.4	Description de la procédure d'échantillonnage du processus conductif	78
3.3.2.5	Eléments de conclusion sur les processus	80
3.4	Proposition alternative d'échantillonnage du processus conductif	81
3.4.1	Introduction	81
3.4.2	Modèle approché en milieu infini	82
3.4.2.1	Modèle approché en milieu infini	82
3.4.2.2	Validation du modèle approché	83
3.4.2.3	Monte-Carlo et modèle approché : marche sur δ -sphere . . .	87
3.4.2.4	Marche sur δ -sphere avec source radiative	88
3.4.3	Modèle approché en géométrie confinée	90
3.4.3.1	Choix d'un pas de discrétisation affiné à la frontière	90
3.4.3.2	Condition de bord et continuité du flux	92
3.5	Conclusion : Une insensibilité en thermique linéaire	94
4	Trois algorithmes de Monte-Carlo Non-Linéaire existants : une tentative de mise en oeuvre en transfert thermique	99
4.1	Description plus approfondie des propositions de Galtier, Dauchet et Terrée .	100
4.1.1	Les algorithmes à collisions nulles	100
4.1.2	Estimation de l'espérance d'une fonction non-linéaire d'une espérance	104
4.1.3	Résolution d'une équation de Boltzmann non-linéaire	112
4.1.4	Synthèse : une combinaison des trois propositions	120
4.2	Tentative pour $\lambda(T)$ en conduction thermique	122
4.2.1	Similitude entre la température T et une densité de particule η	123
4.2.2	Modèle approché, formulation intégrale et algorithme de Monte-Carlo	124
4.3	Tentative pour σT^4 en rayonnement thermique	130
4.4	Tentative pour $h_F(T)$ et $C(T)$ en convection et conduction thermique	139
4.4.1	Tentative pour $h_F(T)$ en convection thermique	139
4.4.2	Tentative pour $C(T)$ en conduction thermique	140
4.5	Conclusion : Vers une méthode approchée	142

5	Thermique Non-Linéaire : Algorithme à Collision nulle et Picard	144
5.1	La méthode de Picard	145
5.1.1	Présentation de la méthode de Picard	145
5.1.2	ACN et Méthode de Picard	147
5.1.3	Monte-Carlo et Méthode de Picard : MCP	149
5.2	Transfert thermique par rayonnement sans linéarisation et MCP	152
5.2.1	Mise en oeuvre sur une configuration académique	153
5.2.1.1	Description de la configuration académique, Cube	153
5.2.1.2	Configuration académique, avec conduction et convection	157
5.2.2	Mise en oeuvre : prise en compte de la récursivité	159
5.2.2.1	Configuration conducto-convecto-radiative, Double Slab	159
5.2.2.2	Étude théorique	160
5.2.2.3	Remarque sur la réduction de variance	167
5.2.2.4	Résultats dans le cas conducto-convecto-radiatif	168
5.2.3	Passage à l'échelle	170
5.3	Transfert thermique par conduction non-linéaire et MCP	171
5.3.1	Résultats en milieu infini	172
5.3.2	Prise en compte d'une frontière	175
5.3.2.1	Avec la stratégie naïve	175
5.3.2.2	Avec la stratégie de Milnes	176
5.3.3	Résultats en géométrie fermée bornée	183
5.3.3.1	Mise en oeuvre dans une configuration académique : Mur en dimension 1 en régime stationnaire	183
5.3.3.2	Mise en oeuvre dans une configuration académique : Carré au stationnaire	189
5.4	Conclusion de la mise en oeuvre de l'algorithme MCP	191
6	Synthèse	192
6.1	Notre question	192
6.2	Notre proposition : Monte-Carlo Picard	193
6.3	Deux stratégies sans approximation qui ouvrent des perspectives...	196
6.4	Une perspective complémentaire : MCP et le calcul des sensibilités	198
7	Perspectives	199
7.1	Changement de variable en thermique non-linéaire	199
7.1.1	Changement de variable en rayonnement	200
7.1.2	Transformation de Kirchhoff	201
7.1.3	Vers le couplage	203
7.2	Méthode de Monte-Carlo exacte pour le Rayonnement en σT^4	205
7.3	Monte-Carlo Non-linéaire et le calcul des sensibilités	216
7.4	Conclusion	245
Annexe A	Rappels Probabilités et Notations	248
A.1	Variables Aléatoires	248
A.2	Fonction de Répartition, Densité de Probabilité et Espérance	254
A.2.1	Fonction de répartition	254
A.2.2	Densité de probabilité	256

A.2.3	Espérance	258
A.2.3.1	Généralisation de l'espérance à des fonctions de v.a	259
A.2.4	Variance et Ecart-Type	260
A.3	Échantillonnage d'une variable aléatoire	261
Annexe B Construction de la fonction de Green en Milieu-Semi-Infini 1D et dans un segment 1D par la méthode image		263
B.1	Milieu Semi-Infini 1D	263
B.2	Milieu Segment 1D	266
B.2.1	Construction de la densité	266
B.2.2	Densité de probabilité dans le segment	267
B.2.3	Preuve de l'algorithme	268
Annexe C Méthode des fonctions de Green : Exemples en thermique		271
C.1	Exemple 1 : Couplage Conducto-Convecto-Radiatif en milieu semi-infini	271
C.2	Exemple 2 : Couplage Conducto-Radiatif avec source en milieu infini homogène	274
Annexe D Linéarisation et rayonnement		276
Annexe E Impossibilité de gérer le non-linéaire avec la marche sur δ-sphere		278
E.1	Approximation du modèle	278
E.2	Formulation intégrale	278
E.3	Etude de l'algorithme de Monte-Carlo	279
E.4	Conclusions et impossibilité	281
Annexe F Construction de la marche Méso		282
F.1	Notations	282
F.2	Approximation P1	283
F.3	Approximation de diffusion	284
F.4	Validité de l'approximation de diffusion	284
Annexe G Condition de bords : Milne		286
G.1	Construction théorique de la condition de Milnes	286
G.2	Première impasse	288
G.3	Deuxième impasse	289
Annexe H Comparaison des marches Macro et Méso pour la conduction		290
H.1	Introduction	290
H.2	Instationnaire en milieu infini conductivité uniforme	291
H.2.1	Résultats instationnaire en milieu infini 2D	291
H.2.2	Explication du mauvais comportement du méso à temps court	292
Annexe I Une preuve des Algorithmes à Collisions nulles		295
Annexe J Linéarisation et MCP en rayonnement		298
J.1	Conséquence de la linéarisation T_L	298
J.2	Mise en oeuvre de la méthode de Picard	300

Annexe K Algorithmes de Monte-Carlo	305
K.1 σT^4	306
K.2 $h_F(T)$	309
K.3 $C(T)$	310
K.4 $\lambda(T)$	310
K.4.1 Choix de la conductivité et adimensionnalisation	312
K.4.2 Choix du pas de discrétisation	312
K.4.3 En géométrie confinée : Milne	313
Annexe L Une reformulation en rayonnement σT^4	317

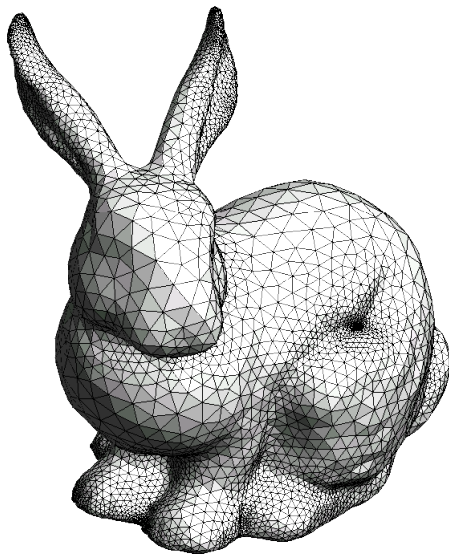
Chapitre 1

Problématique

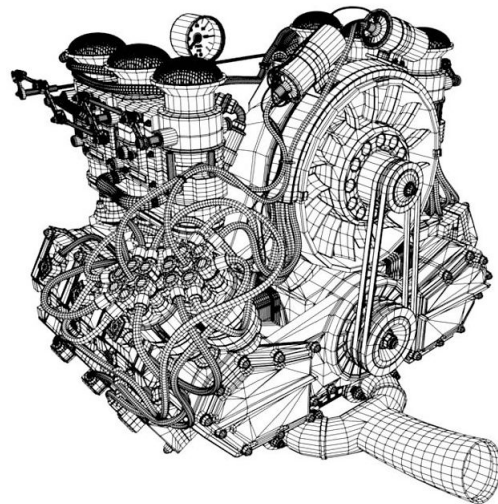
1.1 Contexte et problématique

De nos jours, les demandes sociétales concernant la maîtrise de l'énergie sont nombreuses : isolation thermique, contrôle de la température, optimisation énergétique, augmentation du transfert de chaleur, refroidissement, domotique, refroidissement des systèmes électroniques de puissance, ... Au vu de ces demandes, les ingénieurs sont confrontés au besoin de raffiner la description de leurs objets d'étude, physiquement et géométriquement, pour rendre compte des transferts thermiques couplés dans des géométries décrites à partir de

- représentations numérisées de type CAO impliquant des centaines de milliers de facettes (modèles géométriques de grande taille [1]) :



(a) The Stanford Models : Stanford Bunny 725000 triangles (source [1])



(b) Exemple typique de maillage d'un moteur

FIGURE 1.1 – Illustrations de représentations numérisées de type CAO.

- où les rapports d'échelle tendent vers l'infini de très grandes valeurs en termes de puissance de 10, les dimensions allant du millimètre au kilomètre,

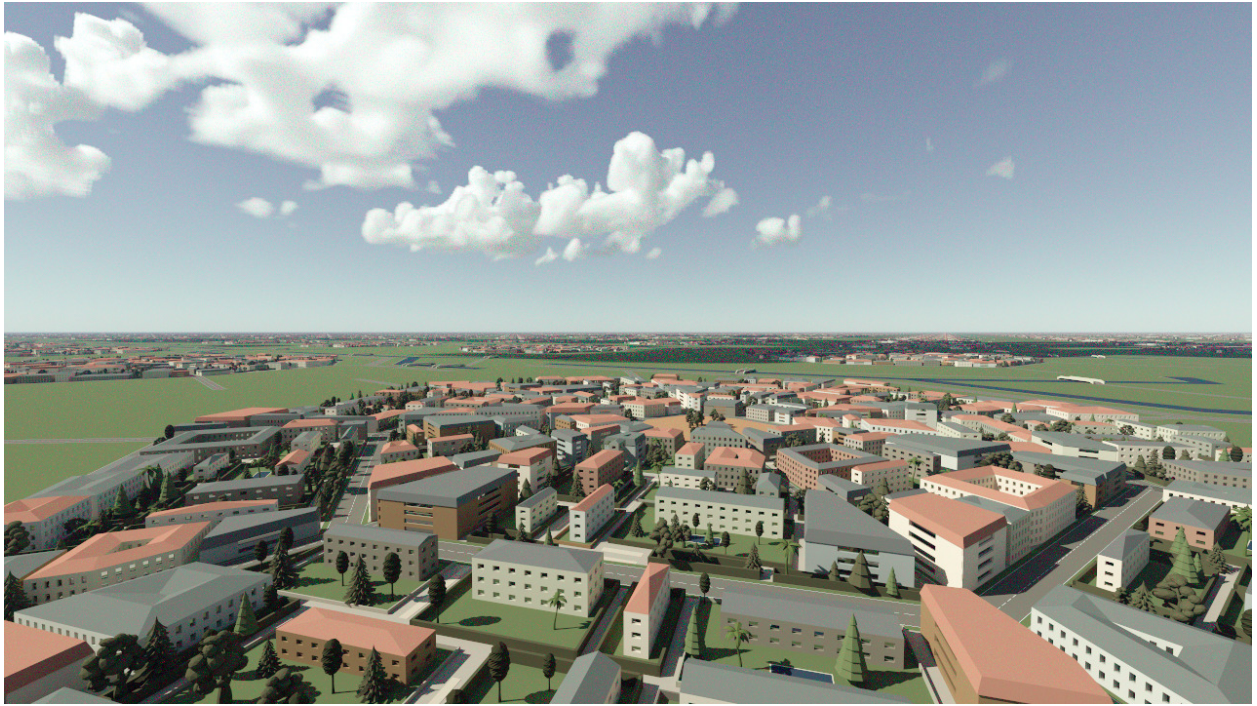


FIGURE 1.2 – Illustration d’une géométrie complexe. La ville est entièrement décrite à partir d’un fichier de type CAO, les nuages sont décrits à partir de données volumiques (résultat LES, *Large Eddy Simulation*). L’image est reconstruite suivant le principe de l’image de synthèse avec une résolution supplémentaire du transfert radiatif dans les nuages. Cette image a été produite avec *htrdr* v 0.5 (source : [2])

Comme bon nombre de chercheurs et/ou d’acteurs dans ce domaine, et peut-être à tort, nous résumons ce type de configurations par le terme "géométrie complexe".

Aujourd’hui, la question des approches possibles pour simuler les transferts de chaleur couplés dans de telles géométries devient une question qui prend de plus en plus d’importance au sein des laboratoires de recherche et des industries.

Pour simuler de tels transferts dans de tels contextes, la pratique du physicien ingénieur est d’avoir recours à des méthodes numériques, appelées déterministes, telles que les Différences, Volumes ou Éléments Finis. Malheureusement, ces méthodes s’effondrent du point de vue pratique lorsque l’on augmente la complexité géométrique. Cette impasse est essentiellement due à deux difficultés :

- le temps ingénieur et le temps de calcul associés à la phase de conception du maillage en volume qui sera le support du calcul et qui doit donc être raffiné localement en fonction des caractéristiques géométriques,
- les coûts en temps de calcul associés à la résolution numérique, elle même sur la base d’un maillage volumique de très grande taille.

Même si notre réflexion reste essentiellement théorique, dans cette thèse nous avons en tête des types de géométries pour lesquelles ces deux facteurs sont limitants et mènent à une impraticabilité de la méthode (Fig. 1.2).

Dans le contexte de l'ingénierie énergétique, partant de ce type de constats, la seule alternative généralement envisagée est d'affaiblir le problème en élaborant des modèles "effectifs" équivalents, c'est-à-dire des modèles beaucoup plus intégrés que ceux de la physique des transferts thermiques usuels. On peut songer à l'exemple d'un modèle de milieu homogène équivalent permettant de remplacer la physique de petite échelle au sein d'un milieu poreux par une physique intégrant, à l'échelle pertinente du point de vue énergétique (souvent beaucoup plus grande que l'échelle du pore), tous les couplages entre brins, entre pores, par rayonnement, conduction et convection tridimensionnels instationnaires. On entend souvent la dénomination "modèle réduit" pour ce type d'approches, mais il ne faut pas oublier que ce sont des travaux dans lesquels il s'agit au contraire d'intégrer finement toute la complexité de la petite échelle. Bien sûr, la question de la quantification des incertitudes, de leur propagation d'une échelle de modélisation à une autre, devient parfois critique, mais au delà de sa motivation calculatoire (utiliser des modèles effectifs car sinon le calcul numérique de la solution du problème de thermique serait infaisable), ce type de travail est aussi à voir comme une brique essentielle de la pratique de l'ingénieur énergétique car c'est à partir de ces modèles effectifs qu'il parvient à une pensée du problème dans son ensemble et construit une confiance en ses choix de conception.

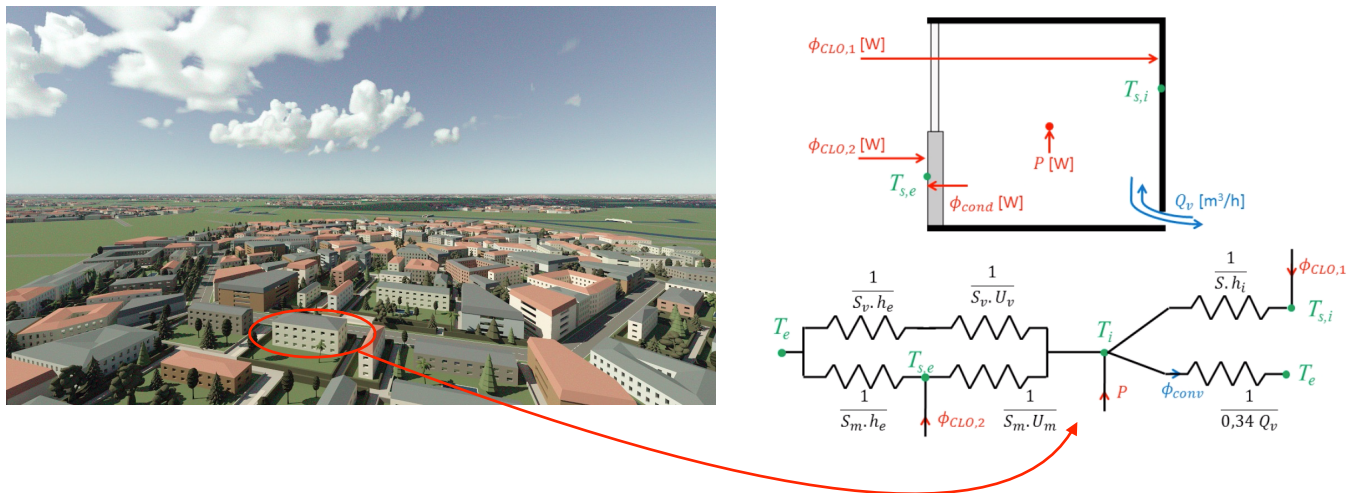


FIGURE 1.3 – Illustration du principe de modèle réduit : remplacer toute la complexité d'un bâtiment par un schéma électrique "équivalent".

Notre positionnement est, au moins en apparence, à l'opposé du précédent : il consiste à proposer un outil de calcul numérique permettant de contourner cette étape de production et d'évaluation de modèles réduits, et pour cela nous explorons l'idée d'employer un autre type de méthode numérique, appelé statistique. Nous partons donc d'une physique donnée et nous nous posons la question de simuler les transferts thermiques dans des systèmes de complexité géométrique élevée sans faire appel à ce savoir-faire de réduction des modèles. Pour autant, même si nous n'y reviendrons que très peu dans le manuscrit, nous avons bien en tête que le sens d'une telle simulation est aussi de fournir un moyen de nourrir et de gagner de la confiance en les modèles effectifs de l'ingénieur : notre outil statistique peut être utilisé dans des phases de validations théoriques des outils de l'ingénieur et d'analyse des comparaisons entre simulations et observations, via le calcul de la solution en un ensemble de "points sonde" ponctuels, surfaciques ou volumiques, ainsi que le calcul de la sensibilité aux paramètres de conception.

Les techniques de résolution statistique auxquelles nous allons nous intéresser sont bien connues, notamment dans le domaine du transfert radiatif. Dans cette communauté de la physique du rayonnement, les méthodes de type Monte-Carlo prennent une place importante, aussi bien au sein des laboratoires de recherche que dans les centres de recherche et développement industriels, car elles permettent :

- de garder un intuitif en accord avec le modèle de rayonnement, via l'échantillonnage de chemins radiatifs,
- et de produire des résultats en dimension trois très facilement, comme par exemple le calcul des facteurs de forme.

En revanche, concernant les transferts de chaleur par conduction et convection, cette approche a été très peu utilisée. Même si certains chercheurs ont proposé des techniques astucieuses et des mises en œuvre efficaces, leurs généralisations et les répercussions dans notre communauté sont minimales par rapport au reste des travaux et de la pratique établie.

Il est d'ailleurs très étonnant de constater que le physicien pense au quotidien la physique du linéaire grâce au principe de superposition et à la proposition de Green¹, à l'origine des méthodes de Monte-Carlo, et que pourtant ces méthodes soient si peu employées pour la résolution des transferts thermiques linéaires, à l'exception du transfert radiatif.

Cette rupture entre le transfert radiatif et les autres transferts se comprend de par la difficulté de mise en œuvre des algorithmes de Monte-Carlo. Un des transferts thermiques les plus étudiés est sans doute le transfert de chaleur par conduction auquel est associé l'idée que les temps de calcul nécessaires à l'échantillonnage des chemins conductifs (mouvement brownien) sont rapidement prohibitifs, même dans des géométries très simples.

Aujourd'hui ces préjugés sont remis en question, notamment du fait de l'augmentation des puissances de calcul (la parallélisation étant par exemple devenue immédiate) mais surtout grâce à un énorme travail réalisé par la communauté de la synthèse d'image ! Dans cette communauté, la question principale concerne la capacité à produire des images de synthèse en simulant la luminance en chaque pixel d'un cadre virtuel placé dans une scène extrêmement complexe, entièrement conçue par des artistes. Le calcul de cette luminance, décrite par l'équation de transfert radiatif, est réalisé aujourd'hui à partir d'une méthode de Monte-Carlo en suivant un grand nombre de chemins radiatifs, partant de chaque pixel, se déplaçant dans la scène jusqu'à atteindre les différentes sources. Outre ses performances calculatoires, cette stratégie repose sur une volonté de séparer le travail de l'artiste, qui peut ainsi concevoir des scènes aussi compliquées qu'il le souhaite (tant d'un point de vue géométrique que physique) et celui de l'informaticien numéricien s'occupant de la partie résolution numérique. La question de la génération des chemins dans de telles scènes a donné lieu à une littérature abondante, dont le principal bénéfice (pour nous) est la production d'outils informatiques capables d'évaluer efficacement l'intersection entre un rayon et une géométrie composée de facettes appelé *intersecteur rayon-triangle*. L'intérêt principal de cet outil, est qu'il est "insensible" à la complexité géométrique, c'est-à-dire au nombre de facettes et aux rapports d'échelle ! Cette propriété est qualifiée d'*orthogonalité données/traitement* autour de ce qui est aujourd'hui devenu un concept : le "Teapot in a Stadium" qui fait référence à la capacité à rendre compte de la petite échelle des reflets d'une théière raffinée

1. La méthode des fonctions de Green permet de penser la physique linéaire comme la "propagation" de l'information provenant de l'ensemble des sources

dans l'environnement immense d'un stade de foot. L'essentiel de l'approche repose sur l'idée de structures accélératrices associées à un pré-traitement de la donnée géométrique dans lequel l'information est triée de façon hiérarchique.

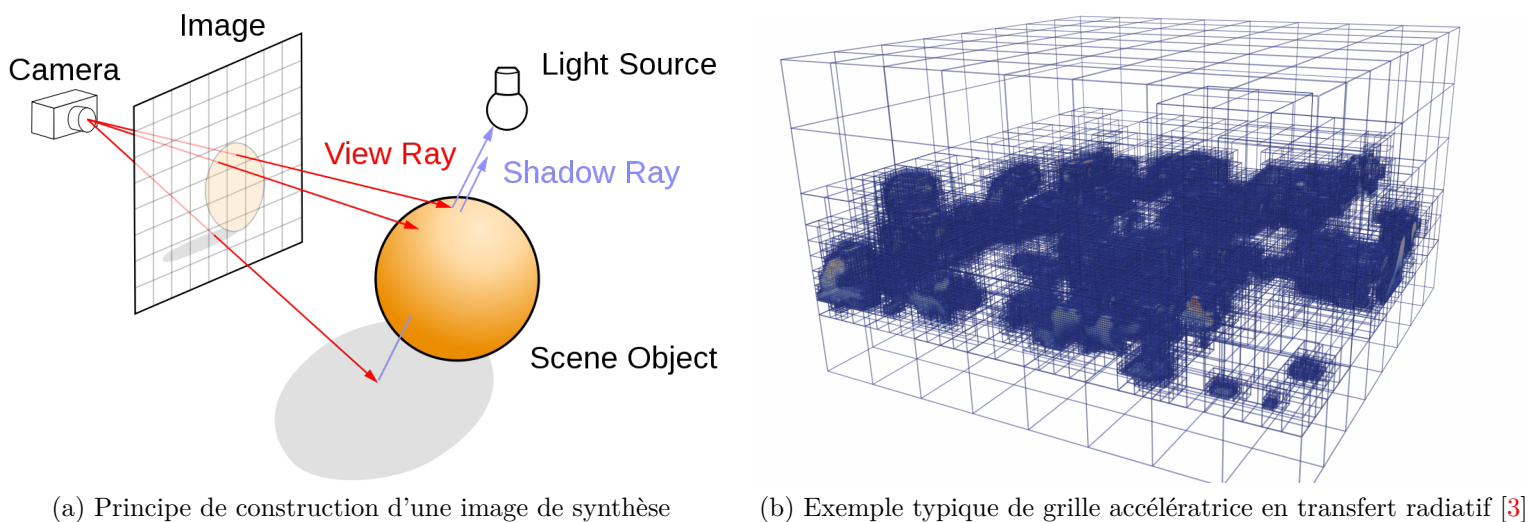


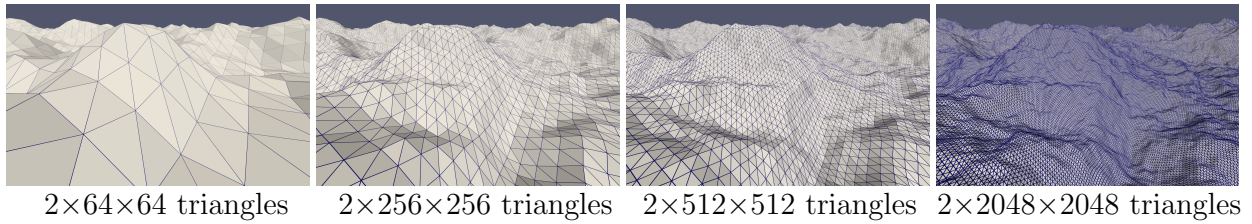
FIGURE 1.4 – Illustration de la notion de lancer de rayon et de grille accélératrice. A gauche, une illustration du principe de lancer de rayon. A droite, une grille accélératrice non régulière obtenue à partir d'une scène nuageuse issue de simulation LES (source [3]).

Dans le cadre des travaux de thèse de Najda Villefranque en collaboration avec Météo-France, un algorithme de Monte Carlo a été mis en place pour réaliser des calculs radiatifs sur des scènes nuageuses issues de simulation LES [3]. En utilisant des outils de la synthèse d'image de type grille hiérarchique sur les données volumiques et surfaciques (voir figure 1.4b), des images de synthèse de scènes nuageuses sur des orographies de terrain ont pu être obtenues, un exemple est donné en figure 1.5. Comme escompté, les figures 1.5 et 1.6 mettent en exergue l'insensibilité du temps de calcul requis pour réaliser ces simulations au raffinement de la donnée d'entrée, que cette dernière soit surfacique dans le cas de la géométrie, ou volumique dans le cas du champ d'épaisseur optique issu de la simulation LES.

Ces deux figures illustrent ce que la communauté de recherche sur la méthode de Monte Carlo entend par traitement efficace des géométries complexes. Le temps de calcul ne change pas lorsqu'on passe d'une surface opaque décrite avec 10^4 triangles à une surface contenant 10^7 triangles. De même, un volume dont les hétérogénéités sont décrites sur une grille régulière $1000 \times 1000 \times 1000$ ne demande aucun temps de calcul supplémentaire par rapport à un volume de propriétés similaires décrit sur une grille $50 \times 50 \times 50$.

A la suite de ces travaux, la question de l'évaluation par Monte-Carlo des transferts de chaleur couplés et la caractérisation de leurs performances a été entièrement remise en question. Il a été récemment montré que la formulation intégrale de Green du transfert thermique couplé instationnaire pouvait être reformulée en un algorithme de Monte-Carlo Linéaire qui aborde la solution de manière directe, c'est-à-dire en échantillonnant, via l'intersecteur rayon-triangle (ce qui a notamment demandé une adaptation des algorithmes conductifs) des chemins de transfert de chaleur qui combinent la conduction, la convection et le rayonnement au plus bas niveau de façon très efficace. Rappelons que le principal avantage d'une telle

a) Ground geometries representing orography



b) Relative rendering time of scenes of increasing complexity

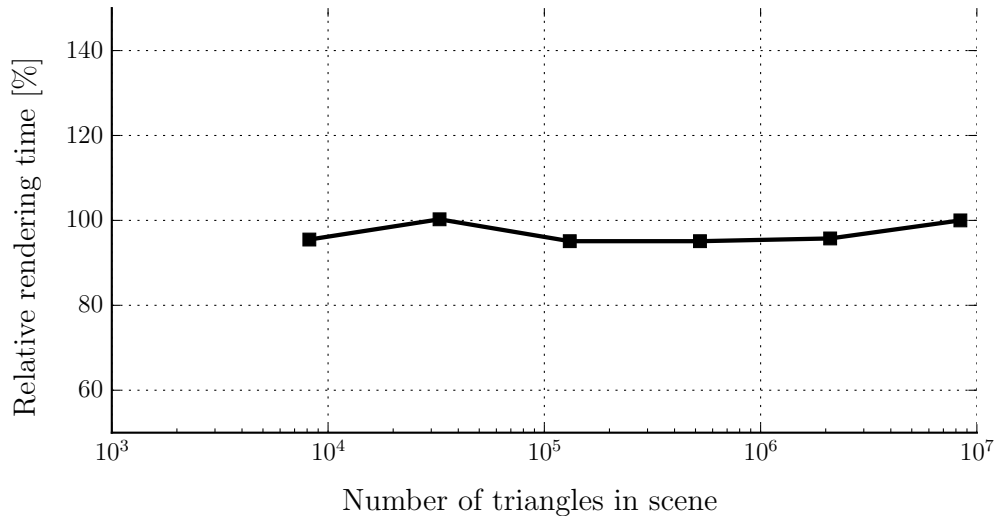
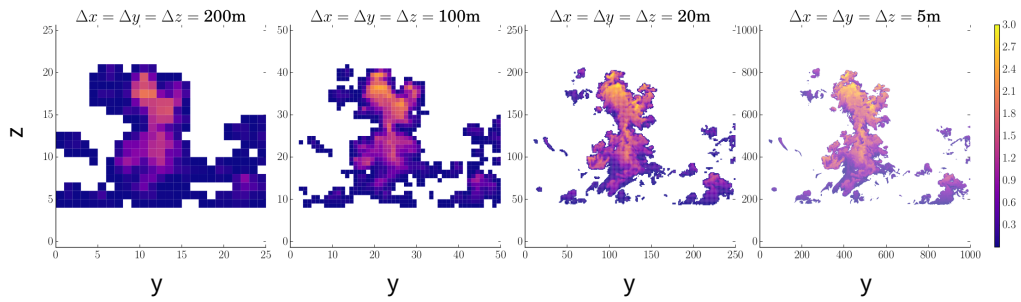


FIGURE 1.5 – Dépendance du temps de calcul d’un rendu au raffinement de la donnée géométrique surfacique. a) Illustration du sol à différents raffinements en nombre de triangles. b) Evolution du temps de calcul du rendu relatif au temps de calcul obtenu pour le meilleur raffinement en fonction du raffinement de la donnée surfacique en nombre de triangles.

approche, un avantage directement lié à la linéarité, est que la température à un endroit et à un instant donnés peut être évaluée sans avoir besoin de construire l’intégralité du champ de température, ce qui permet une praticabilité de la méthode dans des géométries aussi complexes que celles de la Figure 1.7. On retrouve donc une forte similitude avec les algorithmes de Monte-Carlo associés au transfert radiatif standard (voir Fig. 1.2 pour une illustration de l’insensibilité à la complexité géométrique en rayonnement), cette similitude ne s’arrêtant pas là, car à chaque transfert sera associé un chemin de transfert de chaleur qui se propagera dans l’espace en remontant le temps.

a) Vertical cross section r_c [g/kg] in cloud fields of increasing resolution



b) Relative rendering time of scenes of increasing resolution

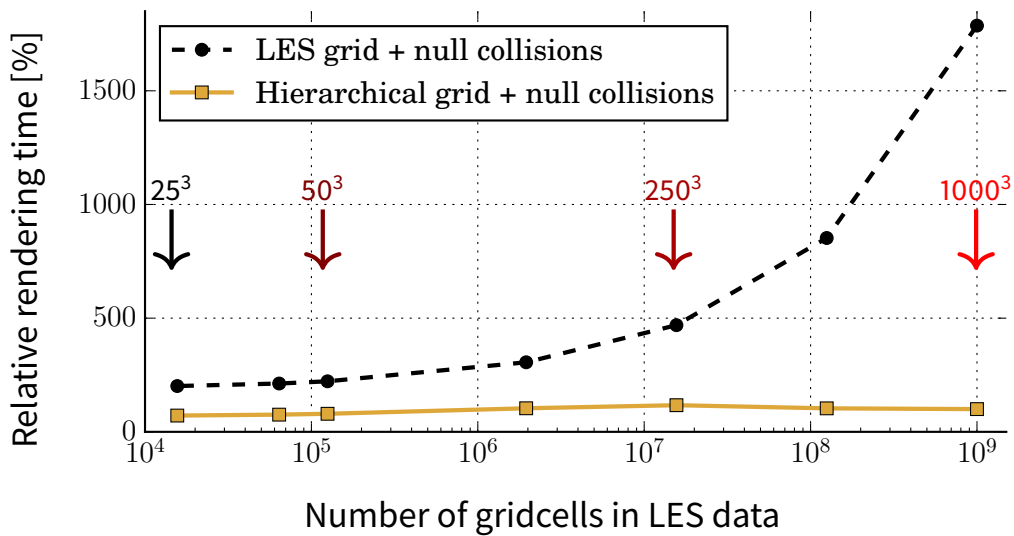


FIGURE 1.6 – Dépendance du temps de calcul d’un rendu au raffinement de la donnée paramétrique volumique dans les nuages. a) Illustration du champ d’épaisseur optique à différents raffinements en nombre de voxels. b) Evolution du temps de calcul du rendu relatif au temps de calcul obtenu pour le meilleur raffinement en fonction du raffinement de la donnée volumique en nombre de voxels. Seule la courbe en trait plein orange utilise une structure accélératrice pour accéder à la donnée.

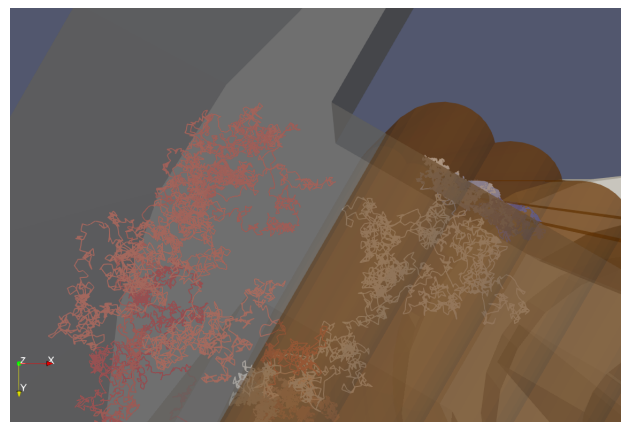
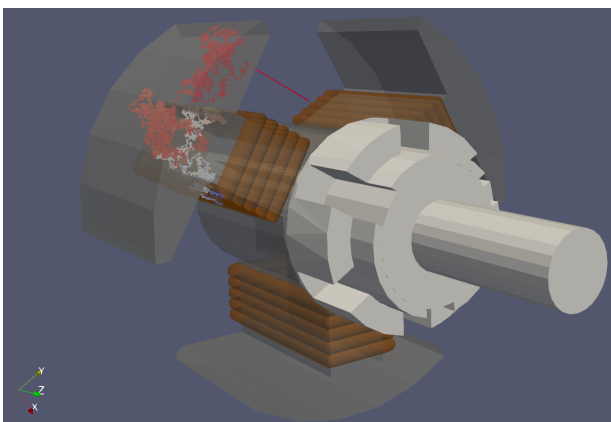


FIGURE 1.7 – Illustration d’un chemin conducto-radiatif dans un moteur

En revanche, toute cette démarche ne vaut que pour des physiques linéaires, telles que celles décrites dans le Chapitre 3, la méthode de Green étant incompatible avec le non-linéaire, la conception d'un algorithme de Monte-Carlo n'est plus aussi simple, le principe de superposition étant "perdu". La littérature propose néanmoins tout un ensemble de techniques permettant de gérer les non-linéarités dans un cadre apparenté aux méthodes de Monte Carlo usuelles. Dans le domaine de la thermique et de la mécanique des fluides, la plus connue d'entre elles s'appelle *simulation directe Monte-Carlo* (DSMC). Elle est très utilisée en cinétique des gaz. Ces méthodes se rapprochent essentiellement des méthodes déterministes via l'emploi d'une discrétisation temporelle, d'un maillage en volume et d'un ensemble de particules appelé essaim. Cet essaim, doit recouvrir le mieux possible la scène géométrique de telle sorte que chaque maille contienne suffisamment de particules. Une fois cette étape réalisée, pour chaque pas de temps, les particules se déplacent dans la scène, restant dans la même maille ou passant d'une maille à une autre, les "collisions" (ou interactions, traduisant la non-linéarité) sont prises en compte en évaluant la statistique des particules situées dans la même maille (ou dans quelques mailles du voisinage).

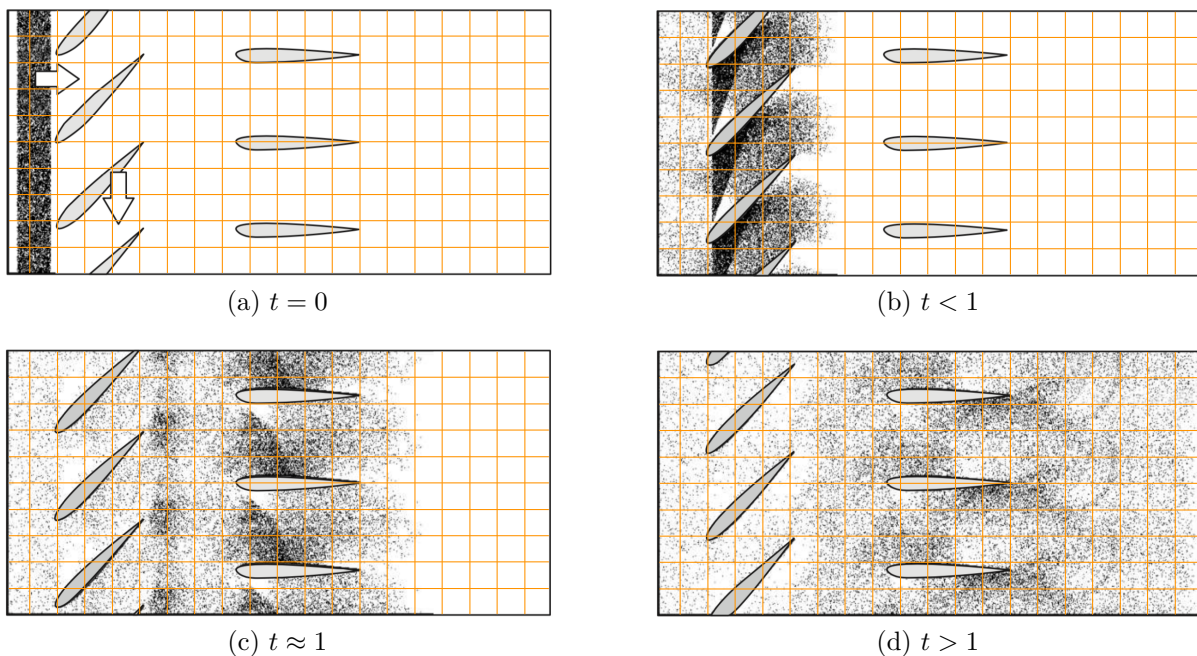


FIGURE 1.8 – Illustration d'une simulation réalisée à partir de la méthode DSMC (source [4]). Les particules collisionnent non pas avec les particules les plus proches, mais avec une statistique uniforme par morceau dans chaque maille. Cette statistique est reconstruite à chaque pas de temps à partir de la répartition de l'essaim. Les mailles représentées ici sont rajoutées par nous-mêmes et sont seulement schématiques : elles ne reflètent pas l'échelle réelle des distances d'interaction utilisée par les auteurs.

Malheureusement, avec ces technique, on perd tout le bénéfice propre à Monte-Carlo. En effet, au lieu de suivre une seule particule, il devient nécessaire de suivre l'ensemble des particules constituant l'essaim et cet essaim doit couvrir tout le champ, avec suffisamment de particules dans chaque maille pour permettre les raisonnements statistiques. On observe alors

- une explosion du nombre de particules en géométrie complexe,

- et il devient extrêmement compliqué de propager l'évaluation des incertitudes d'un pas de temps sur l'autre.

Pour ces deux raisons, notre choix se porte vers une méthode de Monte-Carlo sans essaim, sans discrétisation temporelle conservant toutes les bonnes propriétés de la théorie de Monte-Carlo initiale, pour attaquer la résolution de transferts thermiques non-linéaires couplés, et ceci malgré le fait qu'il a été identifié dès les années 1950 que "*l'extension de MC aux processus non linéaires peut être impossible*" [5] et que de nos jours encore il est courant de considérer que "*les MMC ne sont généralement pas efficaces pour les problèmes non linéaires*" [6], de sorte qu' "*un problème non linéaire doit généralement être linéarisé pour que la technique de Monte Carlo puisse être employée*" [7].

Malgré ces affirmations, des travaux importants ont montré depuis la faisabilité d'approches de Monte Carlo dans le non-linéaire, sans discrétisation temporelle et sans essaim [8, 9]. Mais aujourd'hui, si cette piste de travail nous a semblé envisageable dans un contexte applicatif comme celui de l'ingénierie énergétique, c'est grâce à trois travaux récents [10, 11, 12] que nous prendrons donc le temps d'énoncer avec précision dans le chapitre 4 et qui sont synthétisés dans [13]. Chacun de ces trois travaux signifiera pour nous un concept clé, les trois concepts pouvant être agencés de façon à produire un algorithme de Monte Carlo "branchant" pour chacun des problèmes de transfert thermique non-linéaire que nous avons étudiés. Nous mentionnons ici très brièvement ces trois travaux en proposant un résumé rapide de l'ensemble de notre démarche :

Notre travail a démarré avec une première idée, une première envie, qui est d'employer la technique des algorithmes à collision nulle, une vieille idée de la physique du transport : rajouter des collisionneurs virtuels de sorte que le milieu paraisse homogène pour une particule le traversant, mais "rejeter" les collisions supplémentaires en les traduisant par des diffusions vers l'avant, c'est-à-dire des collisions qui ne changent rien à la trajectoire. Cette idée a été revisitée en profondeur par Mathieu Galtier du point de vue du Monte Carlo non-linéaire [14, 10] et cette revisite a eu des retombées très grandes dans notre communauté [15, 16, 17, 18, 19, 13]. L'emploi de cette technique nous oblige par contre à penser l'ensemble des transferts thermiques comme des physiques du transport ! Pour la physique du rayonnement c'était immédiat, mais il a fallu repenser la convection et la conduction en termes de "collisions", ce qui est loin d'une approche en première lecture. De façon peut-être étonnante, chaque transfert a pu rentrer dans ce cadre bien particulier : nous avons considéré quatre problèmes de transferts thermiques non-linéaires et tous ont finalement été similaires à une seule équation de transport entièrement pilotée par un coefficient d'extinction k fonction de la température recherchée. Cette dépendance à la température entraîne une hétérogénéité du coefficient d'extinction, qu'il devient possible de prendre en compte, sans aucune difficulté ni approximation, via la technique des algorithmes à collision nulle ! A ce stade, apparaissent deux difficultés :

- Premièrement, puisque le coefficient $k \equiv k(T)$ dépend de la température T qui est l'observable que l'on cherche à évaluer, il devient nécessaire de connaître T pour reconstruire la statistique des collisions. Bien sûr, l'accès à T étant impossible, nous utilisons la proposition de G. Terrée (deuxième source de notre travail de formulation [20]) qui consiste à remplacer T (la température locale) par la température récupérée au bout d'un chemin (conductif, radiatif ou convectif). Ainsi, à chaque fois que l'information

de k est nécessaire, un chemin est généré. Ces chemins supplémentaires, sont appelés des *branches* et l'algorithme de Monte-Carlo résultant est qualifié de branchant !

- Deuxièmement, le profil de la fonction $T \mapsto k(T)$, qui dépend du transfert thermique étudié, est potentiellement une fonction non-linéaire de T . Pour gérer n'importe quels profils, nous utilisons la proposition de J. Dauchet (troisième source [15]) qui est basée sur l'idée de l'emploi d'un développement en série entière de k . Cette technique a pour conséquence qu'à chaque fois que l'information de k est nécessaire, plusieurs branches sont générées.

L'inconvénient avec cette stratégie, est qu'elle n'est efficace qu'à grand nombre de Knudsen c'est-à-dire lorsque le nombre de collisions moyen le long d'une trajectoire est faible. Nous verrons que, dans nos situations, le Knudsen est petit, et il sera alors nécessaire de proposer une technique supplémentaire dont l'objectif sera d'éviter l'explosion du nombre de branches !

1.2 Plan du document

Dans cette thèse, nous commençons par présenter une introduction très générale de la méthode de Monte-Carlo, en rappelant les concepts de base mais également tous les fondamentaux : le lien entre formulation intégrale et algorithme de Monte-Carlo, omniprésent dans ce manuscrit, le principe de double randomisation (section 2.1.4) capital lors de l'étude des transferts thermiques, le principe du calcul des sensibilités par Monte-Carlo (section 2.1.6) ainsi que la différence entre Monte-Carlo Linéaire et Monte-Carlo Non-Linéaire dans la section 2.2. Ce chapitre peut être ne pas être lu en première lecture pour les personnes déjà familiarisées avec ces différentes notions et engagées dans une pratique régulière de la méthode de Monte-Carlo.

Dans le Chapitre 3, nous nous intéressons à la résolution par Monte-Carlo de problèmes thermiques linéaires couplés. Dans ce cadre bien particulier (voir section 3.1), nous considérons des systèmes où l'ensemble des paramètres physiques peuvent être hétérogènes, les différents fluides contenus dans les cavités sont supposés parfaitement mélangés à chaque instant et le rayonnement est linéarisé autour d'une température de référence. Ce choix est motivé par le but d'obtenir un système différentiel linéaire pour ensuite, pouvoir appliquer la méthode des fonctions de Green. Nous verrons alors, comment "reformuler" cette formulation en un algorithme de Monte-Carlo efficace, tellement efficace, que selon cette approche il n'a même pas été nécessaire d'introduire l'idée de chemin (section 3.2). En contre-partie, cette stratégie ne conduit à des algorithmes praticables que dans des configurations très académiques. Pour contourner cette difficulté nous définirons la notion de chemin en faisant appel à la proposition de Feynman-Kac. Cette seconde approche permet d'exprimer la température comme une espérance sur un processus menant à une vision en espace de chemins, chemins qui nous le verrons, combinent les trois types de transferts (section 3.3). A ce stade, nous disposerons de deux lectures (formulation de Green, espace de chemins) mais les algorithmes de Monte-Carlo associés souffriront toujours d'une difficulté d'adaptation aux géométries complexes qui nous intéressent, essentiellement à cause du transfert conductif. Nous ferons alors le choix de considérer un modèle conductif approché, décrit dans la section 3.4 qui hérite, au même titre que le rayonnement, de tout le bénéfice de l'intersecteur rayon-triangle. A l'issue de ce travail, nous proposons un algorithme de Monte-Carlo efficace pour la résolution de problèmes thermiques linéaires couplés au sein d'une géométrie complexe. La structure de ce chapitre

a été pensée dans le but de proposer une synthèse théorique en accord avec la pratique de résolution des problèmes de thermique linéaire qui s'est développée ces dernières années au sein de la plateforme de recherche EDStar [21, 22] et a donné lieu au développement du code de calcul Stardis [23]. Aucune non-linéarité n'y est prise en compte, mais le couplage entre modes de transfert est entièrement réalisé avec une méthode de Monte-Carlo sans essaim.

Dans le chapitre suivant, Chapitre 4, nous proposons une première tentative de résolution de problèmes de transfert thermique non-linéaires par Monte-Carlo sans essaim. Notre proposition s'appuie sur les trois stratégies décrites dans [13]. Un des objectifs de ce chapitre est de faire rentrer chacun des problèmes de transfert thermique listés ci-après dans un cadre formel unifié (formulation intégrale justifiant un algorithme de Monte-Carlo Non-Linéaire branché) :

- la conduction avec une conductivité dépendant localement de la température, $\lambda(T)$ (section 4.2),
- le rayonnement entre surfaces opaques grises, σT^4 (section 4.3),
- la condition à la limite conducto-convective avec un coefficient d'échange convectif dépendant de la température, $h_F(T)$ (section 4.4.1),
- la conduction avec une capacité calorifique dépendant de la température locale, $C(T)$ (section 4.4.2).

Nous insisterons ensuite sur les caractéristiques communes aux algorithmes résultants. L'une d'elle est malheureusement le caractère impraticable dû au trop grand nombre de branchements. Nous clôturerons ce chapitre par un effort de synthèse où nous laisserons de côté la spatialisation. Chaque équation intégrale associée à l'un des problèmes de transfert que nous avons étudiés deviendra alors similaire à une même équation différentielle, dont la structure bien particulière sera à l'origine des développements proposés au prochain chapitre.

Dans le Chapitre 5, nous concentrons notre travail sur cette équation afin de proposer une solution, qui puisse être ensuite directement transposée à l'ensemble des transferts non-linéaires. Dans nos premières tentatives, nous avons bien sûr tenté de préserver le caractère "exact" de la méthode de MC, mais toutes ont abouti à des impasses : explosion du nombre de branches, impraticabilité en géométrie complexe et impossibilité de couplage avec les différents transferts. Nous avons finalement exploré une solution qui consiste à perdre cette exactitude afin de limiter le nombre de branchements (i.e limiter la profondeur de l'arbre) en élaborant une suite de fonctions (T_n) convergeant vers la solution T . L'idée est alors d'estimer par MC un élément T_n , choisi de telle sorte qu'il soit une approximation acceptable de la solution recherchée T . Cette suite (T_n) sera élaborée à partir de la méthode de Picard dont le principe est présenté dans la section 5.1. Cette méthode permet effectivement d'éviter l'explosion du nombre de branches au prix d'une approximation et nous verrons que pour chacun des transferts thermiques que nous avons étudiés, cette approximation est très raisonnable en termes de branchements et conduit à des résultats numériques satisfaisants !

Dans le dernier Chapitre 6, nous commençons par une première conclusion concernant nos algorithmes "branchés" et leur praticabilité en lien avec la méthode de Picard (succès applicatifs et limites observées, section 6). Ensuite, dans la section 7, nous présentons différentes pistes explorées durant la thèse, des explorations qui ont été motivées par les mêmes orientations de recherche que celles ayant conduit au cœur de notre proposition,

mais n'en sont restées qu'au stade de perspectives et nécessiteront un approfondissement. Le chapitre se termine sur une conclusion générale.

Chapitre 2

Introduction à la méthode de Monte-Carlo

Dans ce chapitre, nous présentons un rappel des éléments essentiels mais non exhaustif de la méthode de Monte-Carlo. Nous rappelons le vocabulaire propre à notre pratique, vocabulaire qui sera abondamment repris dans la suite de la thèse. Nous ne ferons qu'effleurer ce que l'on qualifie de Monte-Carlo Non-Linéaire en fin de chapitre. Cette notion au coeur de notre travail sera reprise et détaillée dans le Chapitre 4.

2.1 La méthode de Monte-Carlo

Les méthodes de **Monte-Carlo** (MMC) ont été développées dans les années 1940 par Ulam, Von Neumann, (Fermi) et Metropolis [24], et consistent à échantillonner¹ un estimateur M_n d'une grandeur m exprimée comme l'espérance d'une variable aléatoire (v.a.) $X : m = \mathbb{E}_X(X)$. Cette méthode a été largement détaillée dans de nombreux ouvrages [25, 26].

Elles reposent sur deux grands théorèmes, *la loi des grands nombres* et le *théorème central limite* [27, 28] : la loi des grands nombres permet de construire un estimateur M_n de la grandeur m et le théorème central limite permet de construire un intervalle de confiance, appelé également barre d'erreur, centrée autour de la valeur de l'estimateur.

La méthode de Monte Carlo permet de déterminer simultanément une estimation m_n de m et un intervalle de confiance $i_n(\alpha)$ contenant m à un risque α prescrit : $\mathbb{P}(m \in i_n(\alpha)) = 1 - \alpha$, cette propriété faisant d'elle une **méthode de référence** (les méthodes déterministes ne fournissant aucune barre d'erreur).

Cette méthode statistique constitue une alternative aux méthodes déterministes dans la résolution de problèmes physiques de par sa capacité à être très peu sensible à la dimension et à la géométrie ainsi que sa facilité de programmation, la parallélisation étant complètement naturelle. C'est d'ailleurs, bien souvent, l'une des seules méthodes numériques envisageables pour résoudre de tels problèmes en *géométrie complexe*.

1. produire numériquement une réalisation d'une variable aléatoire

2.1.1 Principe de la méthode de Monte-Carlo

L'approche de Monte-Carlo consiste à estimer une observable m exprimée sous forme d'une espérance,

$$m = \mathbb{E}_X (\psi(X)) \quad (2.1)$$

où X est une variable (ou vecteur) aléatoire et ψ une fonction quelconque. On dira que l'observable m est **probabiliste** et qu'elle est issue d'un problème probabiliste.

2.1.1.1 Choix d'une formulation intégrale

En pratique pour les variable aléatoires continues (ou une somme discrète pour les v.a. discrètes), on préfère travailler avec l'expression intégrale de l'espérance, que l'on appelle **formulation intégrale**,

$$m = \underbrace{\int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) dx}_{\text{échantillonnage de } x \text{ suivant } X} \underbrace{\psi(x)}_{\text{poids de Monte-Carlo}} \quad (2.2)$$

où p_X est la densité de probabilité de la v.a. X , définie sur le domaine \mathcal{D}_X . Le poids de Monte-Carlo sera parfois noté entre crochets $[\psi(x)]$ pour simplifier la lecture.

Ce choix est motivé par le fait de faire apparaître explicitement les densités de probabilité. L'accès à ces densités nous permet alors de reformuler le problème souvent dans le but d'optimiser le MC², comme par exemple en changeant de loi de tirage :

$$m = \underbrace{\int_{\mathcal{D}_X} p_Y(y) dy}_{\text{échantillonnage de } y \text{ suivant } Y} \underbrace{\frac{p_X(y)\psi(y)}{p_Y(y)}}_{\text{poids de Monte-Carlo}} \quad (2.3)$$

où Y est une v.a. définie sur le domaine \mathcal{D}_X dont la densité de probabilité p_Y est strictement positive. Changer la loi d'échantillonnage permet par exemple :

- de remplacer une loi compliquée par une loi connue et donc facilement échantillonnable,
- réduire la variance dans le but d'accélérer la vitesse de convergence de l'algorithme, comme expliqué dans la section 2.1.3.

Nous verrons également tout au long de cette thèse, que la grandeur peut être exprimée comme l'espérance d'un vecteur aléatoire (ou d'une variable aléatoire en dimension supérieure) de taille infinie et que la formulation intégrale permet de réaliser une lecture statistique rapide³ de l'algorithme de Monte-Carlo associé.

2. par abus de langage, on dira le MC au lieu de dire l'algorithme de Monte-Carlo.

3. Prenons comme exemple une grandeur m exprimée comme l'espérance $m = \mathbb{E}_{\vec{X}}(\psi(\vec{X}))$ sur un un vecteur aléatoire à deux composantes $\vec{X} = (X_1, X_2)$, alors la formulation intégrale permet la lecture statistique suivante :

$$m = \underbrace{\int_{\mathcal{D}_{X_1}} p_{X_1}(x_1) dx_1}_{\text{échantillonnage de } x_1 \text{ suivant } X_1} \underbrace{\int_{\mathcal{D}_{X_2}} p_{X_2}(x_2) dx_2}_{\text{échantillonnage de } x_2 \text{ suivant } X_2} \underbrace{\psi(x_1, x_2)}_{\text{poids de Monte-Carlo}} \quad (2.4)$$

2.1.1.2 L'algorithme de Monte-Carlo

L'algorithme de Monte-Carlo évaluant une estimation de la grandeur m est obtenu à partir de la lecture statistique⁴ de la formulation intégrale (2.2) ou de façon équivalente de la formulation en espérance (2.1). Il consiste à construire un échantillon $\{x_i, i \in [1, \dots, n]\}$ constitué de n réalisations indépendantes de la variable aléatoire X , puis à évaluer la moyenne arithmétique m_n des images par ψ de chaque réalisation pour obtenir une estimation de la grandeur m ,

$$m_n \simeq m$$

où $m_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i$ avec $w_i = \psi(x_i)$ appelé **poids de Monte-Carlo**. L'algorithme de Monte-Carlo tel que nous venons de le décrire de façon générique est détaillé ci-dessous :

<pre> 1 sum = 0; 2 sum2 = 0; 3 foreach i in 1 :N do 4 Échantillonner x suivant p_X; 5 w = ψ(x); 6 sum = sum + w; 7 sum2 = sum2 + w²; 8 m_n = sum / N; 9 σ_{X,n} = 1/√N (sum2 / N - m_n²); </pre>	≈	$\int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) dx \psi(x) \quad (2.2)$
--	---	--

où le calcul de $\sigma_{X,n}$ est rendu nécessaire à l'élaboration d'un intervalle de confiance associé à l'estimation m_n (voir section 2.1.2).

Dans toute la suite du manuscrit, nous utiliserons implicitement l'équivalence entre la formulation intégrale 2.2, et l'algorithme de Monte-Carlo. Les lignes 1 – 3 et 6 – 9 étant similaires à tous MC, nous ne détaillerons que les échantillonnages des densités de probabilité et les poids de Monte-Carlo associés. Maintenant que nous venons de présenter la construction très générale du MC, nous allons nous intéresser à sa vitesse de convergence vers m .

2.1.1.3 Convergence et loi des grands nombres

La convergence de cet algorithme est garantie par la **loi des grands nombres** qui assure la convergence, dite presque sûre⁵ voir [27, 28], de l'estimateur non biaisé⁶ M_n vers la grandeur m :

$$M_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} m \quad (2.5)$$

où $M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \psi(X_i)$ est une fonction de variables aléatoires, donc une variable aléatoire, avec $(X_i)_{i \in \{1, 2, \dots, n\}}$ une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées

4. lecture statistique de (2.2) : on échantillonne x suivant X , on récupère $\psi(x)$ comme poids de Monte-Carlo, la moyenne arithmétique de ces poids étant un estimateur de m .

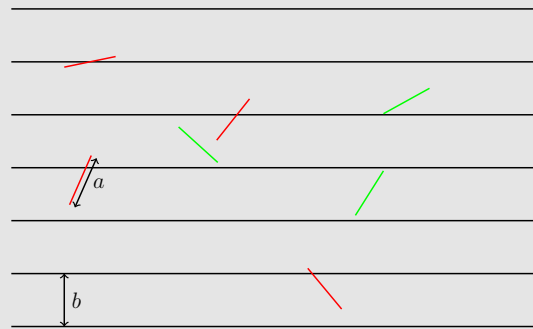
5. Dans l'équation (2.5), m est vue comme la variable aléatoire constante prenant la valeur m (la convergence presque sûre ne pouvant être définie qu'entre variables aléatoires)

6. le biais $B(X)$ est défini comme l'écart entre la grandeur à estimer m et l'espérance de la v.a. $\mathbb{E}_X(X)$: $B(X) = |\mathbb{E}_X(X) - m|$. Un estimateur est non biaisé si le biais est nulle.

(par la suite on dira en abrégé i.i.d.⁷) suivant X .

Exemple : Cas probabiliste

Considérons le problème bien connu de l'aiguille de Buffon : Quelle est la probabilité P qu'une aiguille de longueur a lâchée "sans la moindre intention" sur un parquet dont les lames ont une largeur $b \geq a$ et une longueur infinie, coupe une rainure du parquet ?

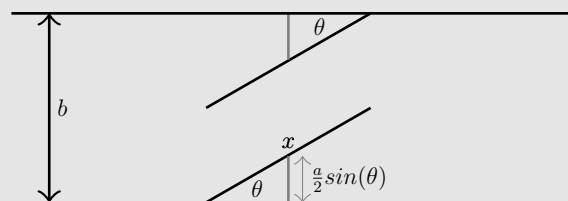


Par construction, la probabilité m n'est rien d'autre que l'espérance de la variable aléatoire Y qui modélise le phénomène aléatoire du lâché, jusqu'à l'intersection ou non de l'aiguille avec la rainure, la réalisation étant égale à 1 si il y a intersection et 0 sinon.

Pour modéliser ce phénomène, on considère que les lames de parquet sont toutes identiques les unes aux autres. Ainsi, par symétrie, il nous suffit alors d'en considérer qu'une seule. Ensuite, nous choisissons de modéliser un lâché d'aiguille sans intention particulière par deux variables aléatoires X et Θ , telles que X représente la position du centre de l'aiguille et Θ représente l'angle aigu formé entre la lame et la rainure du parquet.

Voici les hypothèses de modélisation :

- La variable aléatoire X suit une loi uniforme dans la lame.
- La variable aléatoire Θ suit une loi uniforme sur $[0, \pi/2]$.
- Les variables aléatoires X et Θ sont indépendantes.



Sous ces hypothèses, la probabilité m est exprimée comme une espérance que l'on écrit

7. i.i.d. signifie que se sont des variables aléatoires qui suivent toutes la même loi de probabilité et sont indépendantes

sous une formulation intégrale,

$$m = \int_0^{\pi/2} f_{\Theta}(\theta) d\theta \int_0^b p_X(x) dx \begin{pmatrix} \mathcal{H}\left(x < \frac{a}{2} \sin(\theta)\right) 1 \\ + \mathcal{H}\left(\frac{a}{2} \sin(\theta) < x < b - \frac{a}{2} \sin(\theta)\right) 0 \\ + \mathcal{H}\left(x > b - \frac{a}{2} \sin(\theta)\right) 1 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

où $\mathcal{H}(C)$ vaut 1 si la condition C est vérifiée et 0 sinon. La notation H fait référence à la fonction de Heaviside $H(x)$ qui vaut 1 si $x > 0$ et 0 sinon. Nous avons choisi de ne pas employer cette fonction Heaviside H et conservons notre application \mathcal{H} , dans le but de simplifier les écritures et la lecture. Cette application \mathcal{H} sera employée dans toute la suite de la thèse.

Par un calcul élémentaire, on en déduit que $m = \frac{2a}{\pi b}$.

Algorithme 1 : Fonction F_m d'échantillonnage de m . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même $w = 0$ ou $w = 1$.

```

1 Échantillonner  $\theta$  suivant  $\Theta$  ;
2 Échantillonner  $x$  suivant  $X$  ;
3 if  $x < \frac{a}{2} \sin \theta$  then
4   |  $w = 1$  ;
5 else if  $\frac{a}{2} \sin \theta < x < b - \frac{a}{2} \sin \theta$  then
6   |  $w = 0$  ;
7 else
8   |  $w = 1$  ;

```

2.1.1.4 Reformulation d'une observable déterministe en une observable probabiliste

Les observables que nous appellerons déterministes issues de problèmes déterministes dont l'origine peut être biologique, physique, financière ou autre, peuvent être exprimées sous forme d'une somme, d'une intégrale ou de la solution d'une équation différentielle, mais pas spontanément sous forme d'une espérance. Ainsi, contrairement aux observables construites sur un processus probabilistes, les observables déterministes ne sont pas immédiatement traitable via Monte-Carlo.

Nous choisissons d'estimer ces observables, ce qui nécessite une étape de **reformulation** supplémentaire qui consiste à transformer un problème déterministe en un problème probabiliste. Prenons l'exemple d'une observable m exprimée comme une simple intégrale,

$$m = \int_a^b \psi(x) dx$$

où ψ est une fonction quelconque. Pour transformer m en une observable probabiliste, nous

procédons à la reformulation suivante,

$$\begin{aligned} m &= \int_a^b p_X(x) dx \frac{\psi(x)}{p_X(x)} \\ &= \mathbb{E}_X \left(\frac{\psi(X)}{p_X(X)} \right) \end{aligned}$$

où X est une variable aléatoire arbitraire, de densité de probabilité p_X strictement positive, définie sur le domaine $[a, b]$.

La grandeur m étant à présent exprimée comme une espérance, il devient possible de résoudre ce problème déterministe par une simulation de MC. Bien sûr, p_X n'est pas unique et le choix de cette variable aléatoire doit être fait avec précaution.

Exemple : Reformulation d'un problème déterministe en un problème probabiliste

Considérons le problème déterministe suivant : Supposons que l'on souhaite estimer l'aire d'une surface s qui est définie telle que $\mathcal{A}(s) := \int_{\mathbb{R}^2} dx \mathcal{H}(\vec{x} \in s)$.

Au lieu d'utiliser une méthode déterministe, qui consisterait à résoudre cette intégrale de façon exacte par changement de variable, par intégration par parties, ... ou via des techniques d'intégration approchées, nous choisissons de transformer ce problème déterministe en un problème probabiliste dans le but de le résoudre statistiquement par MC.

Pour cela, nous commençons par reformuler l'expression intégrale de l'aire en une formulation statistique intégrale de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(s) &:= \int_{\mathbb{R}^2} dx \mathcal{H}(\vec{x} \in s) \\ &= \int_{x_{min}}^{x_{max}} dx \int_{y_{min}}^{y_{max}} dy \mathcal{H}((x, y) \in s) \\ &= \int_{x_{min}}^{x_{max}} p_X(x) dx \int_{y_{min}}^{y_{max}} p_Y(y) dy \frac{\mathcal{H}((x, y) \in s)}{p_X(x)p_Y(y)} \end{aligned} \quad (2.7)$$

où l'on note $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$ le plus petit pavé orienté suivant les axes x et y contenant la surface s et (X, Y) un couple de v.a arbitraires à valeurs dans $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$, puis comme une espérance,

$$\mathcal{A}(s) = \mathbb{E}_{X,Y} \left(\frac{\mathcal{H}((X, Y) \in s)}{p_X(X)p_Y(Y)} \right) \quad (2.8)$$

L'algorithme de Monte-Carlo consiste donc à échantillonner un grand nombre de fois de façons indépendantes x suivant X et y suivant Y , puis récupérer comme poids de Monte-Carlo $1/(p_X(x)p_Y(y))$ si $(x, y) \in s$ et 0 sinon. L'estimation de l'aire de s est alors donnée par la moyenne arithmétique de ces poids de Monte-Carlo.

Le problème qui est initialement et naturellement explicité de façon déterministe a pu être reformulé en un problème probabiliste ce qui consiste à exprimer la grandeur d'intérêt comme une espérance.

Dans le cas des transferts thermiques étudiés dans cette thèse : la température T à partir de laquelle on construit les observables, est solution d'une équation ou d'un système

d'équations aux dérivées partielles couplées (EDP). La démarche consiste alors à construire une stratégie dans le but d'exprimer la température comme l'espérance d'une variable aléatoire. Schématiquement, on a :

$$T \text{ solution d'un ensemble d'EDP couplées } \longleftrightarrow T = \mathbb{E}_X(X)$$

Une fois la variable aléatoire X déterminée, on évalue une estimation de la température T grâce à un MC. Un intérêt fondamental de cette méthode numérique, outre sa simplicité de mise en oeuvre et sa praticabilité en géométrie complexe, est sa capacité à produire une barre d'erreur associée à l'estimation.

2.1.2 Estimation de l'erreur statistique

En plus d'estimer la grandeur, la méthode de Monte-Carlo fournit simultanément une barre d'erreur de l'estimation que l'on appelle parfois intervalle de confiance. C'est cette capacité inhérente de MC à fournir un intervalle de confiance, qui lui vaut parfois la dénomination de *méthode de référence*.

2.1.2.1 Construction de l'intervalle de confiance

La construction de la barre d'erreur repose sur une conséquence du *théorème central limite* appelée théorème central limite local :

Théorème 1 (*central limite local*)

Soit $(X_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires réelles, indépendantes et identiquement distribuées suivant X de densité de probabilité p_X , d'espérance m et d'écart-type $\sigma_X > 0$. Si l'on note p_{M_n} la densité de probabilité de

$$M_n := \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n}$$

alors la suite $(p_{M_n})_{n \geq 1}$ converge uniformément vers la densité de probabilité de la loi normale de moyenne m et d'écart-type $\sigma_n := \sigma_X^2/n$:

$$p_{M_n} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{u} \left(x \mapsto \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma_n^2}} \right)$$

D'après ce théorème, l'estimateur obtenu à partir de Monte-Carlo peut être vu comme une réalisation d'une variable aléatoire suivant une loi normale d'espérance m et d'écart-type σ_n , à condition que n soit suffisamment grand.

Cette propriété est un résultat asymptotique et on peut se poser la question suivante : Pour quelle valeur du nombre de réalisations n peut-on considérer que cette approximation est acceptable ?

Une première réponse à cette question est due aux inégalités de Berry-Esseen qui permettent de majorer non asymptotiquement la distance uniforme $\|F_{M_n} - F_{\mathcal{N}}\|_{\infty}$ sous l'hypothèse supplémentaire de l'existence d'un moment d'ordre trois : si l'on pose $m_3 = \mathbb{E}((X - m)^3)$, alors

$$\|F_{M_n} - F_{\mathcal{N}}\|_{\infty} \leq \frac{cm_3}{\sigma_X^3 \sqrt{n}}$$

où F_{M_n} est la fonction de répartition de M_n , $F_{\mathcal{N}}$ est la fonction de répartition de la loi normale de moyenne m et d'écart-type σ_n et c une constante qui est, actuellement, majorée par 0.4748 (voir [29]). En réalité, la convergence est souvent bien plus rapide que celle dûe à la proposition de Berry-Esseen.

Dans la pratique on ne s'intéresse pas à cette vitesse de convergence et on considère par un choix arbitrairement admis par la communauté, que l'estimation est "valable" si la barre d'erreur est de l'ordre du pour cent de la grandeur estimée :

$$\sigma_n \leq \frac{m_n}{100}$$

où m_n est une réalisation de M_n .

Finalement, connaissant le profil de la densité de probabilité de la loi normale, on construit un intervalle de confiance pour la grandeur m . Pour cela, on commence par fixer un risque α (typiquement $\alpha = 0.05$ ou $\alpha = 0.01$) représentant la probabilité que m n'appartienne pas à l'intervalle de confiance⁸.

A partir de ce risque, on construit une variable aléatoire $I_n(\alpha)$ définie telle que,

$$I_n = [M_n - \epsilon\sigma_n, M_n + \epsilon\sigma_n] \quad (2.9)$$

où ϵ est le réel défini par $\mathbb{P}(|N| > \epsilon) = \alpha$ et N est une variable aléatoire suivant une loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$ de densité de probabilité p_N . Ainsi, en vertu du théorème central limite local, on en déduit que I_n et m vérifient,

$$\mathbb{P}(m \in I_n) = \mathbb{P}(M_n \in [m - \epsilon\sigma_n, m + \epsilon\sigma_n]) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} p_N(x) dx = 1 - \alpha \quad (2.10)$$

La dénomination d'intervalle de confiance au risque α d'une réalisation i_n suivant I_n est entièrement justifiée par cette équation (2.10) qui signifie que la probabilité que m appartienne à i_n (échantillonné suivant I_n) est égal à $1 - \alpha$.

2.1.2.2 Echantillonnage de l'intervalle de confiance

Pour échantillonner i_n suivant I_n , on commence par échantillonner $m_n = (x_1 + x_2 + \dots + x_n)/n$ suivant M_n , puis on construit $i_n = [m_n - \epsilon\sigma_n, m_n + \epsilon\sigma_n]$ où $\sigma_n = \sigma_X/\sqrt{n}$. L'écart type σ_X , associé à la variable aléatoire X , n'est en général pas connu ! Pour cette raison, on choisit de le remplacer par $\sigma_{X,n}$,

$$\sigma_{X,n} = \sqrt{\frac{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}{n} - m_n^2} \quad (2.11)$$

où x_i est une réalisation de la v.a. X_i pour $i \in [1, 2, \dots, n]$. Finalement l'intervalle de confiance i_n que nous retenons est,

$$i_n = [m_n - \epsilon \frac{\sigma_{X,n}}{\sqrt{n}}, m_n + \epsilon \frac{\sigma_{X,n}}{\sqrt{n}}] \quad (2.12)$$

A ce stade, on peut s'intéresser à la validité de l'approximation de σ_X par $\sigma_{X,n}$ en s'intéressant à la variance de l'estimateur non biaisé de la variance $\sigma_{X,n}^2 : ((X_1^2 + X_2^2 + \dots + X_n^2)/n - ((X_1 +$

8. Il y a toujours un risque que m ne soit pas inclus dans cet intervalle et ce risque est d'autant plus faible que α est choisi petit !

$X_2 + \dots + X_n)/n)^2$). Nous ne rentrerons pas dans ces détails et nous retiendrons simplement que i_n est considéré comme un intervalle de confiance "acceptable" à condition que $\sigma_{X,n}/\sqrt{n}$ soit de l'ordre du pour-cent de m_n .

La précision de cet intervalle de confiance i_n dépend à la fois de la valeur théorique de l'écart type σ_X et du nombre n de réalisations :

- plus σ_X est petit et plus la précision sera bonne,
- plus le nombre n de réalisations sera grand et plus i_n sera précis.

Il est tout de même intéressant de remarquer la dépendance en $1/\sqrt{n}$, c'est-à-dire que pour gagner un ordre de grandeur sur la barre d'erreur, nous devons multiplier le nombre de réalisations par cent ce qui peut avoir de lourdes conséquences d'un point de vue temps de calcul.

Dans la pratique, les intervalles de confiance considérés standard sont les suivants :

- en prenant $\epsilon = 1$ au risque 68% (et donc $\alpha = 32\%$)
- en prenant $\epsilon = 2$ au risque 95% (et donc $\alpha = 5\%$)
- en prenant $\epsilon = 3$ au risque 99,7% (et donc $\alpha = 0.3\%$)

Contrairement à ce qui est suggéré par le Théorème central limite local, l'intervalle de confiance i_n ainsi élaboré est centrée autour de l'estimation m_n .

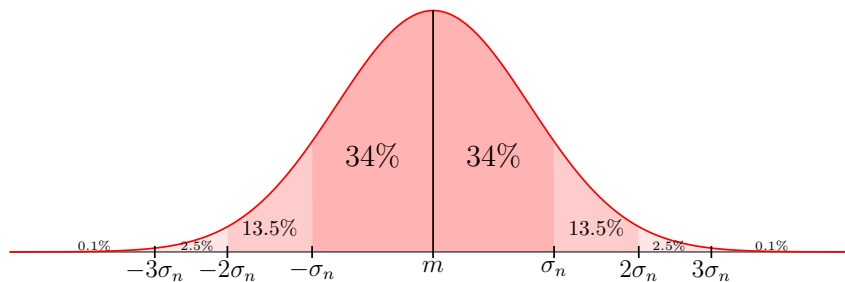


FIGURE 2.1 – Profil de la densité de probabilité d'une loi normale $\mathcal{N}(m_n, \sigma_{X,n}^2)$ centrée autour de m_n et d'écart-type $\sigma_{X,n}$ représentant la densité de présence de la grandeur recherchée m établie par MC.

2.1.3 Technique de réduction de variance

Les méthodes de Monte-Carlo permettent le calcul simultané de la grandeur estimée et d'un intervalle de confiance/barre d'erreur. Nous avons montré, que pour gagner un ordre de grandeur (i.e. diviser la taille de l'intervalle de confiance par dix), nous devons réaliser cent fois plus de réalisations. Ainsi, la stratégie qui consiste à augmenter le nombre de réalisations afin de réduire la barre d'erreur, est une stratégie qui peut s'avérer perdante d'un point de vue calculatoire.

Pour réduire l'intervalle de confiance, il existe plusieurs stratégies développées dans la littérature : l'échantillonnage préférentiel, l'approche par variance nulle ou les techniques de reformulation intégrale.

Nous ne détaillerons pas ces différentes stratégies, elles sont très bien décrites dans [25, 26, 30], mais nous garderons en mémoire que pour optimiser un MC, il est préférable de retravailler la formulation intégrale plutôt que d'augmenter le nombre de tirages.

2.1.4 Double randomisation

La double randomisation fait un usage intensif du principe suivant : *l'espérance d'une espérance est une espérance*. Voyons ce que cela veut dire en pratique. Considérons une grandeur m dont l'expression est donnée ci-dessous :

$$m = \mathbb{E}_X \left(g \left(X, \mathbb{E}_{Y|X} (Y|X) \right) \right) \quad (2.13)$$

où X et $Y|X$ sont des variables aléatoires réelles (v.a.r.) de densité de probabilité p_X et $p_{Y|X}$ respectivement et g une fonction linéaire par rapport à sa deuxième variable, la notation $X|Y$ signifie que la variable aléatoire X dépend de Y , et se lit X sachant Y .

Pour estimer la grandeur m à partir de Monte-Carlo, la première stratégie intuitive consisterait à évaluer une réalisation x de la v.a. X , estimer l'espérance $e \simeq \mathbb{E}_{Y|X=x} (Y|X = x)$ par Monte-Carlo, puis récupérer $g(x, e)$ comme *poinds de Monte-Carlo*. Avec cet algorithme, ce type de stratégie pour calculer m consiste à échantillonner n_x fois la v.a. X , puis pour chaque réalisation x , échantillonner n_y fois la v.a. $Y|X = x$ (qui se lit Y sachant qu'on a échantillonné x suivant X). Le nombre d'échantillonnages est donc de $n_x n_y = n^2$ si on choisit $n_x = n_y = n$. L'inconvénient de cette stratégie, sans parler de la perte de précision due à la propagation des erreurs ($e \neq \mathbb{E}_{Y|X=x} (Y|X = x)$), est qu'elle est inexploitable lorsque le nombre d'espérances emboîtées est grand. En effet, le nombre d'échantillonnages est de l'ordre de n^k où n est le nombre d'échantillons et k le nombre d'espérances emboîtées. Dans grands nombres de problèmes en physique (notamment en transfert thermique traité dans la suite de ce manuscrit) le nombre d'espérances emboîtées est infini.

La stratégie de **double randomisation** permet de contourner cette difficulté : elle consiste à exprimer la grandeur m comme une unique espérance :

$$\begin{aligned} m &= \mathbb{E}_X \left(g \left(X, \mathbb{E}_{Y|X} (Y|X) \right) \right) \\ &= \int_{\mathbb{R}} p_X(x) dx \left[g \left(x, \int_{\mathbb{R}} p_{Y|X=x}(y) dy [y] \right) \right] \\ &= \int_{\mathbb{R}} p_X(x) dx \int_{\mathbb{R}} p_{Y|X=x}(y) dy [g(x, y)] \\ &= \mathbb{E}_{X, Y|X} (g(X, Y|X)) \end{aligned}$$

la linéarité de g est essentielle car elle permet de permuter fonction et espérance (passage de la ligne 2 à la ligne 3) ! On rappelle que les crochets signifient le poids de Monte-Carlo. Lorsque g est non-linéaire, cette stratégie n'est plus praticable comme expliqué dans la section [2.2.2](#).

L'algorithme de Monte-Carlo obtenu à partir du principe de double randomisation évaluant une estimation de la grandeur m est le suivant :

L'algorithme consiste à échantillonner une réalisation x de X , puis une réalisation y de $Y|X = x$, le poids de Monte-Carlo ainsi échantillonné étant $g(x, y)$. L'avantage fondamental de la double randomisation par rapport à la première stratégie est que le nombre d'échantillonnages du vecteur aléatoire pour cet algorithme est toujours de l'ordre de n quelque soit le nombre d'espérances emboîtées (c'est souvent l'intégrale la plus difficile à évaluer qui

détermine le nombre d'échantillonnages). Un autre avantage important de cette technique est que le calcul de la barre d'erreur se fait de façon classique.

Par récurrence, le principe de double randomisation s'applique à une multitude d'espérances emboîtées de taille finie ou infinie.

2.1.5 Exemple de mise en oeuvre de la double randomisation

Exemple : Mise en oeuvre du principe de Double Randomisation

Nous considérons la grandeur t qui correspond physiquement à la transmittivité d'un mur matériel purement diffusif d'épaisseur e notée $[x_0, x_0 + e] \times \mathbb{R}^2$, avec un coefficient de diffusion uniforme noté k , une fonction de phase isotrope, l'atténuation étant exponentielle suivant k (loi de Beer). On fait l'hypothèse que l'éclairage incident est perpendiculaire au mur. La transmittivité s'écrit

$$\begin{cases} t = \int_0^{+\infty} ke^{-kl} dl (\mathcal{H}(x_0 + l > x_0 + e)1 + \mathcal{H}(x_0 + l < x_0 + e)\tau(x_0 + l, y, z)) \\ \tau(x) = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du \int_0^{+\infty} ke^{-kl} dl \begin{pmatrix} \mathcal{H}(x_0 < x + lu_x < x_0 + e)\tau(x + lu_x) \\ +\mathcal{H}(x + lu_x < x_0)0 \\ +\mathcal{H}(x + lu_x > x_0 + l)1 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (2.14)$$

Formellement, on écrit t comme une espérance :

$$t = \mathbb{E}_L (\mathcal{H}(x_0 + L > x_0 + e)1 + \mathcal{H}(x_0 + L < x_0 + e)\mathbb{E}_{\mathcal{T}}(\mathcal{T}(x_0 + L))) \quad (2.15)$$

où

$$\mathcal{T}(x) = \mathbb{E}_{\vec{U}} \mathbb{E}_L \begin{pmatrix} \mathcal{H}(x_0 < x + LU_x < x_0 + e)\mathcal{T}(x + LU_x) \\ +\mathcal{H}(x + LU_x < x_0)0 \\ +\mathcal{H}(x + LU_x > x_0 + l)1 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

où L suit une loi exponentielle de paramètre k et $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z)$ suit une loi uniforme sur la sphère \mathbb{S}^2 . Ces espérances sont emboîtées de façon linéaire. On peut donc utiliser le principe de *double randomisation* et élaborer un MC sans aucune difficulté.

Algorithme 2 : Fonction d'échantillonnage de la transmittivité t d'une couche de longueur e notée $[x_0, x_0 + e] \times \mathbb{R}^2$.

```

1 Échantillonner  $l$  suivant  $L$ ;
2  $x = x_0 + l$ ;
3 if  $x < x_0 + e$  then
4   |  $w = 1$ ;
5 else
6   while  $x \in [x_0, x_0 + e]$  do
7     | Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$ ;
8     | Échantillonner  $l$  suivant  $L$ ;
9     |  $x = x + l$ ;
10    | if  $x < x_0$  then
11      | |  $w = 0$ ;
12      | else if  $x > x_0 + e$  then
13        | |  $w = 1$ ;
14      | else

```

2.1.6 Sensibilités et Monte-Carlo

En sciences de l'ingénieur, les modèles mathématiques permettent bien sur d'aller jusqu'à simuler des phénomènes physiques, mais sont également indispensables pour analyser les mécanismes, faire du dimensionnement, repérer les processus dominants, ...

Ces modèles sont destinés à mimer le phénomène étudié en faisant correspondre à un ensemble de paramètres d'entrée (paramètres physiques du problème) un résultat qui correspond généralement à la valeur de l'observable du problème étudié. L'analyse de sensibilité (les sensibilités n'étant rien d'autre que des dérivées partielles de l'observable aux paramètres), consiste à déterminer, quantifier et analyser comment réagit le résultat du modèle à des perturbations sur les paramètres d'entrée.

Les usages des sensibilités sont nombreux, on peut citer sans exhaustivité :

- **Analyse, prise de décision** : Quelles sont les paramètres d'entrée qui contribuent le plus à la réponse du modèle ? Cela permet par exemple à l'expérimentateur de déterminer quels sont les paramètres d'intérêts pour la mesure.
- **Optimisation, méthode inverse** : A partir des sensibilités on peut mettre en place des stratégies de type descente de gradient pour procéder à la recherche d'optimum (ou des paramètres des problèmes en méthode inverse).

Il est souvent rapide et pratique d'estimer les sensibilités via la méthode des Différences Finies. L'évaluation de la sensibilité ($\partial_\pi m(\pi_0)$) d'une grandeur m à un paramètre π perturbé par accroissement fini du 1er ordre autour d'un paramètre π_0 est approchée par un taux d'accroissement centré

$$\partial_\pi m(\pi_0) \simeq \frac{m(\pi_0 + \delta\pi) - m(\pi_0 - \delta\pi)}{2\delta\pi} \quad (2.17)$$

où $\delta\pi$ est une petite variation de π . Malheureusement, cette méthode des Différences Finies est impraticable efficacement avec les MMC : En effet, si $\delta\pi$ est grand alors l'approximation de la dérivée n'est pas forcément acceptable. Si $\delta\pi$ est petit alors les barres d'erreur associées aux

estimations de $m(\pi_0 + \delta\pi)$ et $m(\pi_0)$ sont plus grandes que la différence $m(\pi_0 + \delta\pi) - m(\pi_0)$, ce qui entraîne une incapacité à estimer l'approximation $\partial_\pi m$.

Pour contourner cette difficulté, il est toujours possible d'augmenter le nombre de réalisations dans le but de réduire la barre d'erreur, mais cela peut avoir de lourdes conséquences du point de vue temps de calcul. Rappelons que le Théorème Central Limite, nous dit qu'il est nécessaire de réaliser cent fois plus de réalisations pour gagner un ordre de grandeur sur la précision, ce qui n'est pas toujours envisageable. Une autre solution serait d'utiliser une technique de réduction de variance (voir 2.1.3) lorsque c'est possible. Dans notre pratique, nous avons adopté une stratégie tout à fait différente. La stratégie adoptée est la suivante : On exprime comme précédemment la grandeur à estimer m sous une formulation intégrale,

$$m(\pi) = \int_{D_X} p_X(x, \pi) dx w(x, \pi) \quad (2.18)$$

où p_X est la densité de probabilité de la variable aléatoire X , π un paramètre et w le poids de Monte-Carlo. L'algorithme évaluant la grandeur m est le suivant : on échantillonne x suivant la densité de probabilité p_X , on récupère le poids $w(x, \pi)$, on répète cette procédure un grand nombre de fois puis on évalue la moyenne des poids ainsi obtenue, cette moyenne étant l'estimation de la grandeur m . Pour évaluer la sensibilité de m par rapport à π , on dérive l'expression intégrale Eq. (2.18) par rapport au paramètre π , puis on fait un travail de reformulation dans le but d'exprimer la sensibilité sous une structure intégrale identique à celle de l'observable. Lorsque le paramètre apparaît dans les densités de probabilité et/ou dans le poids, alors ce travail de reformulation est plutôt simple :

$$\partial_\pi m(\pi) = \int_{D_X} p_X(x, \pi) dx \tilde{w}(x, \pi) \quad (2.19)$$

où $\tilde{w}(x, \pi) = \frac{\partial_\pi p_X(x, \pi)}{p_X(x, \pi)} w(x, \pi) + \partial_\pi w(x, \pi)$ (ici il est sous-entendu que le domaine D_X est indépendant du paramètre π , dans le cas contraire, les choses se compliquent comme expliqué ci-après).

L'algorithme évaluant simultanément la sensibilité et la grandeur est le suivant : on échantillonne x suivant la densité de probabilité p_X , on récupère les poids $w(x, \pi)$ et $\tilde{w}(x, \pi)$, on répète cette procédure un grand nombre de fois puis on évalue la moyenne des poids w et \tilde{w} ainsi obtenus pour évaluer une estimation des grandeurs m et $\partial_\pi m$ respectivement, dans le même MC. Le calcul de sensibilité est donc simultané i.e. il suffit d'un seul Monte-Carlo pour évaluer à la fois la grandeur et la sensibilité. Ce principe étant vrai pour n'importe quel paramètre, il est alors possible d'élaborer un seul Monte-Carlo évaluant une estimation de la grandeur et un gradient par rapport à un ensemble de paramètres d'intérêt simultanément.

Voici quelques références d'applications industrielles où notre communauté a mis en oeuvre cette facilité : dans le domaine des concentrateurs solaires [30], dans le domaine du génie des procédés [15] et dans la communauté atmosphérique [3].

Il est tout de même intéressant de remarquer que si la grandeur est évaluée sans problème de variance, ce n'est pas forcément le cas pour la sensibilité. En général, ces problèmes de variance sur l'évaluation de la sensibilité sont dûs au produit des dérivées logarithmiques $\frac{\partial_\pi p_X}{p_X}$ qui apparaissent dans le poids de Monte-Carlo de la sensibilité noté \tilde{w} dans l'Eq. (2.19).

Actuellement, des travaux, réalisés par Léa Penazzi [31] au sein des laboratoires Laplace et Mines d'Albi, sur la méthode de Monte-Carlo symbolique sont très prometteurs et permettraient une évaluation très efficace des sensibilités. Le Monte-Carlo symbolique [32, 33] a

pour objectif de construire statistiquement (comme un MC classique) une fonctionnelle de la grandeur à estimer. Une fois la fonctionnelle évaluée, il suffit de la dériver pour avoir accès à n'importe quelles sensibilités !

Dans cette thèse, nous ne parlerons pas du calcul des sensibilités géométrique [34, 35]. Ces sensibilités ont lieu lorsque le paramètre π intervient dans la définition du domaine géométrique $D_X(\pi)$. Des travaux [36] concernant le calcul de telles sensibilités sont menés par Paule Lapeyre au sein du laboratoire PROMES.

A ce stade, tous ce dont on a parlé rentre dans le cadre de ce que l'on appelle Monte-Carlo Linéaire (MCL). Nous allons à présent nous intéresser aux Monte-Carlo Non-Linéaire (MCNL) en commençant par définir plus précisément ce que l'on entend par MCL.

2.2 Monte-Carlo Non-Linéaire

2.2.1 Définition de Monte-Carlo Linéaire (MCL)

Les problèmes probabiliste et déterministe rencontrés précédemment, rentrent dans le cadre du Monte-Carlo Linéaire (en abrégé par la suite MCL). Qu'il soit déterministe ou probabiliste, le problème est finalement exprimé comme le calcul d'une seule espérance portant sur une seule variable aléatoire, estimée via la moyenne arithmétique d'un grand nombre de réalisations.

Mais MCL n'est pas restreint à ces deux types de problèmes : le principe de double randomisation permet d'étendre la méthode de Monte-Carlo Linéaire au calcul des grandeurs exprimées comme une multitude d'espérances emboîtées de façon linéaire : la linéarité permettant de permuter l'ensemble des espérances et fonctions linéaires de telle sorte qu'on puisse réécrire la grandeur comme une seule espérance portant sur un vecteur aléatoire (voir l'exemple page 28). Dans cette thèse, nous définissons l'ensemble des problèmes résolubles par MCL de la façon suivante :

Définition 1 (Monte-Carlo Linéaire)

Une grandeur m est résoluble par un algorithme de Monte-Carlo Linéaire si et seulement si elle peut être exprimée de la façon suivante,

$$\begin{cases} m = \mathbb{E}_{X_k} (g_k (X_k, e_{k-1})) \\ e_i = \mathbb{E}_{X_i | \vec{X}_{i+1}^k} (g_i (\vec{X}_i^k, e_{i-1})), \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, k-1\} \\ e_0 = \mathbb{E}_{X_0 | \vec{X}_1^k} (g_0 (\vec{X}_0^k)) \end{cases} \quad (2.20)$$

ou plus simplement comme une seule espérance portant sur le vecteur aléatoire \vec{X}_0^k ,

$$m = \mathbb{E}_{\vec{X}_0^k} (g (\vec{X}_0^k)) \quad (2.21)$$

où

- $k \in \mathbb{N} \cap \{+\infty\}$,
- $\vec{X}_i^k = (X_i, X_{i+1}, \dots, X_k)$,
- $(g_i)_{i \in \{0, 1, \dots, k\}}$ sont $k+1$ fonctions linéaires par rapport à e_{i-1} , i.e. $g_i (\vec{x}, y) = a_i (\vec{x}) + b_i (\vec{x})y$ où a_i et b_i sont deux fonctions (b_i non nulle),

$$\left| \begin{array}{l} \bullet g(\vec{X}_0^k) = g_k(X_k, g_{k-1}(\vec{X}_{k-1}^k, \dots, g_1(\vec{X}_1^k, g_0(\vec{X}_0^k)) \dots)) \text{ est une fonction multili-} \\ \text{néaire,} \end{array} \right.$$

où la notation $X|Y$ signifie que la variable aléatoire X dépend de Y , et se lit X sachant Y .

Si k est fini, le MC consiste simplement à échantillonner un grand nombre de réalisations du vecteur aléatoire \vec{X}_0^k puis réaliser la moyenne arithmétique de l'image par g de ces réalisations. Cette moyenne étant un estimateur non biaisé de m .

Si k est infini, le MC peut être mis en oeuvre sous certaines contraintes sur g , que nous n'explicitons pas ici : lors de l'échantillonnage de X_i , l'algorithme consiste

- soit à récupérer y avec la probabilité b_i et $a_i/(1 - b_i)$ avec la probabilité $1 - b_i$.
- soit à récupérer $y + a_i$ avec la probabilité b_i et a_i avec la probabilité $1 - b_i$.

Ainsi, même si le nombre d'espérances emboîtées est infini, l'algorithme trouve toujours une issue en un nombre fini de tirages, comme illustré dans l'exemple : Mise en oeuvre du principe de Double Randomisation page 28 et dans le chapitre 3, lors de l'étude des transferts thermiques linéaires.

2.2.2 Définition de Monte-Carlo Non-linéaire (MCNL)

Monte-Carlo Linéaire nécessite la linéarité des fonctions g_i par rapport à e_{i-1} permettant l'écriture du problème comme une seule espérance (voir Eq. (2.21)). Dans le cas contraire, lorsque au moins l'un des g_i est non-linéaire, il devient impossible de permuter espérance et fonction non-linéaire sans engendrer un biais.

Pour cette raison, il a été identifié dès les années 1950 que "*l'extension de MC aux processus non linéaires peut être impossible*" [5] et de nos jours il est courant de considérer que "*les MMC ne sont généralement pas efficaces pour les problèmes non linéaires*" [6], de sorte qu' "*un problème non linéaire doit généralement être linéarisé pour que la technique de Monte Carlo puisse être employée*" [7].

Malgré l'ensemble de ces affirmations sur l'impuissance de MC face aux non-linéarités, plusieurs travaux ont permis de mettre en défaut ces préjugés au travers de l'élaboration de MC (toujours sans essaim) suivant différents artifices, permettant la résolution de processus non-linéaires [13]. Ces algorithmes que l'on qualifie de Monte-Carlo Non-Linéaire (MCNL), seront pour nous à l'origine de l'ensemble des développements proposés dans cette thèse dont un récapitulatif des objectifs est décliné suivant les trois points suivants,

1. Evaluer le résultat d'intégrales emboîtées via une non-linéarité de type exponentielle négative (algorithme à collisions nulles ACN voir section 4.1.1 page 100),

$$m_1 = \int_0^{+\infty} k(l) \exp\left(-\int_0^l k(s) ds\right) dl \quad [l] \quad (2.22)$$

où $[l]$ signifie le poids de Monte-Carlo.

2. Evaluer le résultat d'intégrales emboîtées via une fonction non-linéaire développable en série entière (voir section 4.1.2 page 104),

$$m_2 = \mathbb{E}_X(f(X, \mathbb{E}_Y(Y))) \quad (2.23)$$

3. Evaluer la solution d'une équation différentielle non-linéaire ou d'une équation de Fredholm non-linéaire (voir section 4.1.3 page 112),

$$m_3 = \mathbb{E}_X (p(X)X + (1 - p(X))\mathbb{E}_Y(Y)) \quad (2.24)$$

où k est une fonction positive, X et Y sont deux variables aléatoires, et p une fonction à valeurs dans $[0, 1]$.

La première famille est essentiellement issue de la physique du transport linéaire (rayonnement, neutronique, plasmas). Ces travaux n'ont donc pas été initialement perçus comme relevant de MC non-linéaire et pourtant lorsque MC est utilisé pour simuler de telles physiques linéaires, on échantillonne des chemins le long desquels on doit évaluer des exponentielles traduisant de potentielles hétérogénéités ou fluctuations temporelles des partenaires de collision, des exponentielles d'intégrales de la section efficace. Apparaît alors le motif suivant : intégrale sur les chemins d'une exponentielle négative d'une intégrale le long du chemin de la section efficace. Le concept des collisions nulles a permis de résoudre cette difficulté depuis les années 1950. Voir cette idée non plus comme une astuce élégante mais comme une brique essentielle de la littérature de MC non-linéaire est un de nos principaux points de départ (voir section 4.1.1).

La seconde famille est inspirée de la première : il a été montré que les collisions nulles permettent l'évaluation de l'intégrale d'une exponentielle d'une intégrale via un développement en série entière de l'exponentielle et des travaux ont alors montré que cette solution pouvait être étendue à d'autres fonctions que l'exponentielle (voir section 4.1.2).

En termes applicatifs, la troisième famille est plus embryonnaire : il s'agit pour l'essentiel de la physique du transport non-linéaire (équation de Boltzmann non-linéaire pour des gaz raréfiés, notamment en chambre nucléaire) (voir section 4.1.3).

Cette littérature est encore peu abondante, mais chacune des trois familles de travaux que nous identifions a fait émerger des concepts et méthodes nouveaux. Nous prendrons donc le temps de les énoncer avec précision dans le chapitre 4. Par contre, cette précision ne vaut que pour la littérature de Physique. Autant que possible, nous essaierons de faire référence à la littérature de la Mathématique lorsqu'elle aborde des questions voisines, mais notre connaissance de cette littérature est plus parcourue.

2.3 Conclusion

Ce chapitre introductif a débuté avec une description très générale du principe même de la méthode de Monte-Carlo. Nous avons montré que cette méthode statistique nécessite une expression en espérance de l'observable m et que dans le cas contraire, il devient nécessaire de réaliser un travail de reformulation approprié afin d'écrire m comme une espérance. Cette reformulation, est pour nous essentielle, elle est le point de départ pour attaquer la question de la résolution de transfert thermique par MC.

Nous avons ensuite présenté le principe fondamental de Double-Randomisation, qui permet d'étendre le domaine d'applicabilité de la méthode de MC à des observables non plus exprimées comme une seule espérance, mais comme une infinité d'espérances emboîtées ! Sans ce principe, la méthode de MC serait limitée au calcul d'une simple intégrale.

Nous avons ensuite proposé une définition de MCL et de MCNL, en précisant la rupture entre ces deux types de MC et en rappelant les trois grandes idées, qui seront décrites plus

en détail dans le chapitre 4, qui ont permis la mise en oeuvre de MC pour la résolution de problèmes non-linéaires.

Dans le chapitre suivant nous concentrons nos efforts sur la méthode de MCL, en particulier sur l'étude des transferts thermiques linéaires qui sera pour nous le point de départ du Chapitre 4 pour attaquer la question des non-linéarités en thermique.

Chapitre 3

Thermique linéaire

La physique du transfert radiatif corpusculaire s'inscrit dans le cadre de la théorie linéaire du transport de photons, décrite par des équations déterministes qui s'adaptent parfaitement à une formulation en espace de chemins et donc à la résolution par une **Méthode de Monte-Carlo** (MMC) dont une introduction est proposée au Chapitre précédent. Dans ce cadre bien particulier, cette résolution statistique est naturelle et consiste simplement à balayer l'espace des chemins afin d'identifier les conditions aux limites contribuant à la valeur de la grandeur recherchée (comme lors de l'évaluation de la luminance). Cette méthode statistique est la seule à être exacte¹ et son insensibilité à la taille et au niveau de raffinement de la CAO décrivant la géométrie fait d'elle une méthode de référence dans ce domaine.

Notre objectif dans le présent chapitre est de donner les fondements théoriques ayant permis d'étendre cette méthode de MC aux **transferts thermiques linéaires** (nous limiterons l'exposé à un cadre que nous précisons au paragraphe 3.1 avec l'équation (3.7) en conservant l'ensemble de ses bonnes propriétés (insensibilité à la complexité géométrique², facilité de mise en œuvre, ...). La principale difficulté est d'exprimer la température dans le champ comme l'espérance d'une variable aléatoire, une étape importante étant également de s'assurer que l'échantillonnage de cette v.a. est praticable d'une façon compatible avec l'emploi des intersecteurs rayons-triangles. En contre-partie, et comme en transfert radiatif, nous abandonnons l'idée d'un calcul du champ total, et concentrons nos efforts sur des calculs ponctuels, surfaciques et volumiques exacts (appelé points sondes), comme l'estimation de la température en un point et un temps donné.

Nous verrons dans la section 3.2, comment élaborer cette espérance via la **méthode des fonctions de Green** (FG) [37, 38, 39, 40]. Cette méthode permet d'exprimer l'observable comme une intégrale des conditions aux limites³ et des sources (appelées contributions) via un propagateur⁴, que nous reformulons ensuite en une espérance afin de permettre l'élaboration d'un MC. Cette méthode, extrêmement efficace, permet un calcul exact et rapide de l'observable. En revanche, elle n'est praticable que dans des configurations académiques⁵,

1. L'estimateur est non biaisé et sa variance est estimée.

2. Cette insensibilité est la conséquence de l'emploi des outils de la communauté de la synthèse d'image : intersecteur rayon-triangles et grilles accélératrices. Elle se traduit par une forme d'insensibilité du temps de calcul au niveau de raffinement de la donnée géométrique.

3. en généralisant, on considère que les "conditions aux limites" sont les conditions de bord et la condition initiale

4. le rôle du propagateur est de quantifier l'influence des conditions aux limites et des sources sur la grandeur

5. Par configuration académique, nous désignons des configurations très fréquemment référencées, bien

là où le propagateur est généralement connu [41, 42, 43, 39, 44, 45, 46, 47, 48]. Même si certains travaux proposent des solutions permettant d'étendre son domaine d'applicabilité comme dans [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58], l'échantillonnage est en toute généralité soit très lourd soit impraticable.

Pour remédier à cette difficulté, nous allons faire appel à la théorie des **Processus Stochastiques** (PS) [59] afin de construire un nouvel outil permettant l'échantillonnage de ces contributions. Cet outil est appelé processus et permet d'exprimer la grandeur comme une espérance via la notion de chemins. Ces chemins (les réalisations du processus) ont tous pour origine le point sonde et leurs trajectoires se terminent à l'une des potentielles contributions (les mêmes que celles qui auraient été échantillonnées par la méthode de Green). L'algorithme de MC consiste alors à échantillonner un grand nombre de chemins afin de calculer la moyenne arithmétique des contributions récupérées au bout de ces trajectoires. Nous verrons une nouvelle fois que cet outil n'est malheureusement pas aussi insensible à la complexité géométrique que souhaité concernant le transfert conductif.

Nous proposons alors de remplacer le modèle de la conduction par un modèle approché continu dans la section 3.4 avec comme motivation l'élaboration d'un MC qui soit insensible au niveau de raffinement de la géométrie et ceci en employant les mêmes outils que ceux utilisés en transfert radiatif ! Cet algorithme sera élaboré à partir de l'idée première à l'origine de la méthode des fonctions de Green : la grandeur résulte de la propagation des conditions aux limites et des sources, et de celle des Processus Stochastiques, qui est d'échantillonner ces différentes contributions via des chemins.

Avant d'entamer le développement de la méthode, nous voulons lever une ambiguïté qui risque de brouiller les cartes pour le lecteur. Nous allons utiliser de façon systématique dans les sections concernant la méthode des fonctions de Green, les termes de "propagation", "propager", "transporter", "saut", pour indiquer le mode d'action par lequel les fonctions de Green font en sorte que *l'information* remonte des sources, conditions aux limites, condition initiale "vers" un point d'observation donné à un instant donné. Nous sommes conscients qu'il s'agit d'un abus de langage (commode) mais nous n'avons pas trouvé de remplaçant afin de l'exprimer simplement. Par ailleurs, les termes de propagateur, propagation figurent aussi dans des ouvrages de référence sur ces méthodes. Quoi qu'il en soit, dans la méthode de Green, rien ne transporte l'information d'un point à un autre en suivant un chemin, aucun vecteur, aucun mouvement, l'information qui va donner le résultat attendu est instantanément "diffusée" dans tout le milieu.

Sans cet avertissement préalable, l'ambiguïté pourrait rester très forte, car précisément lorsque dans la suite immédiate des méthodes de Green, on parlera de Processus Stochastiques, il y aura là véritablement propagation, chemin ou trajectoire et transport.

3.1 Description des différents transferts de chaleur

Dans ce chapitre on ne considère que des transferts thermiques linéaires : les paramètres physiques tels que la conductivité λ , la densité massique ρ , ... sont indépendants de la température, les transferts conductif et convectif sont linéaires et le transfert radiatif est linéarisé autour d'une température de référence notée T_{ref} . Ce choix est motivé par le but de proposer des formulations exactes de la température, ce qui n'est actuellement pas possible lors de la prise en compte d'un transfert non-linéaire qui sera l'objet des prochains chapitres.

étudiées, et donnant lieu à des résultats classiques exprimés le plus souvent sous forme analytique.

Nous choisissons également de laisser de côté les conditions aux limites de type Neumann (flux de chaleur imposé à la frontière), ainsi que les puissances volumiques, dans le but de simplifier la lecture de la démarche proposée ici (leur prise en compte n'étant pas source de difficulté).

Dans un esprit de généralité, on décrit Figure 3.1 une configuration géométrique abstraite illustrant les trois types de transfert avec des sous-systèmes solides, des cavités fluides en englobant ou non d'autres... Cette configuration nous permettra (section 3.1.4) de poser des équations couplant les trois modes de transfert d'une façon restant représentative de toute une diversité de situations de la réalité technologique. Il faut imaginer qu'on pourra faire coïncider cette configuration générique avec des problèmes de thermique de l'ingénieur tels que milieux poreux (Fig. 3.2), puce électronique (Fig. 3.3) et systèmes électroniques de puissance refroidis par des échangeurs à air ou diphasiques, récepteur thermique dans une centrale solaire à concentration (Fig. 3.4), moteurs électriques, habitations ou villes, ...

Avant de présenter le système couplé, une description des trois transferts thermiques linéaires considérés dans ce chapitre est proposée dans les trois paragraphes suivants, en commençant par le rayonnement, la conduction puis la convection.

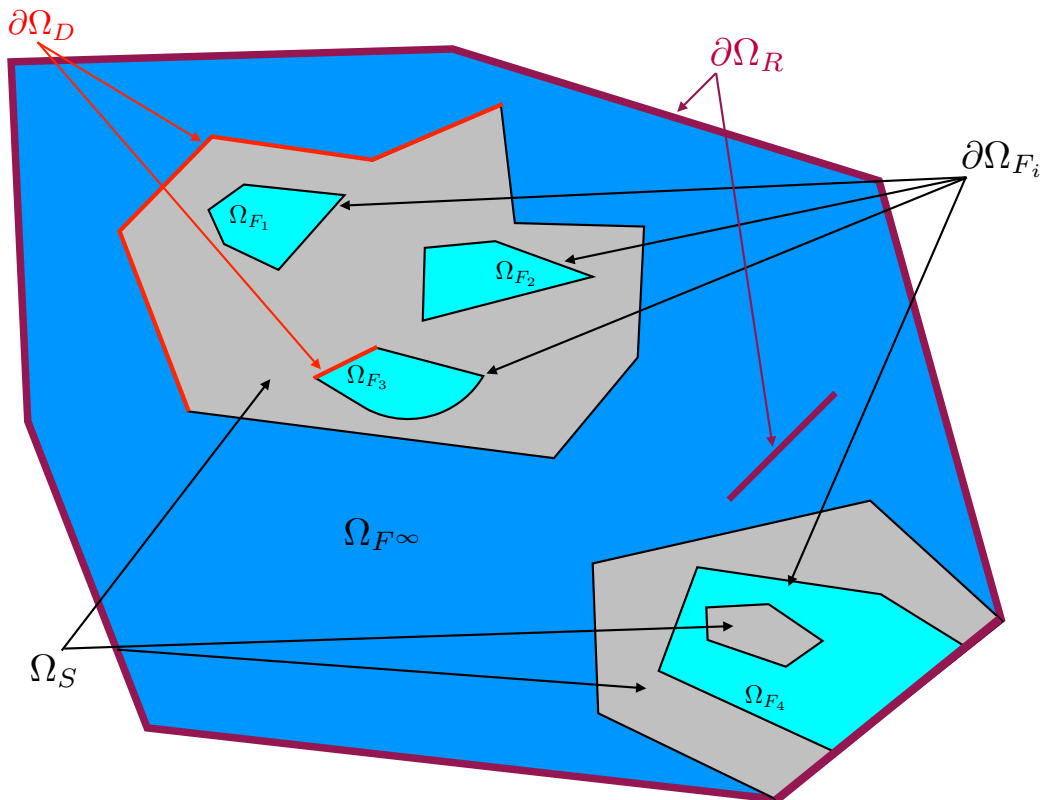


FIGURE 3.1 – Illustration d'une configuration conducto-convecto-radiative. Dans cette illustration, le domaine solide Ω_S est représenté en gris, m cavités fluides Ω_{F_i} sont représentés en bleu clair, et la cavité fluide englobante $\Omega_{F\infty}$ est représenté en bleu foncé. Le rayonnement est présent dans toute la scène, le système est entièrement semi-transparent, la conduction a lieu uniquement dans les solides et la convection a lieu aux interfaces fluide / solide.

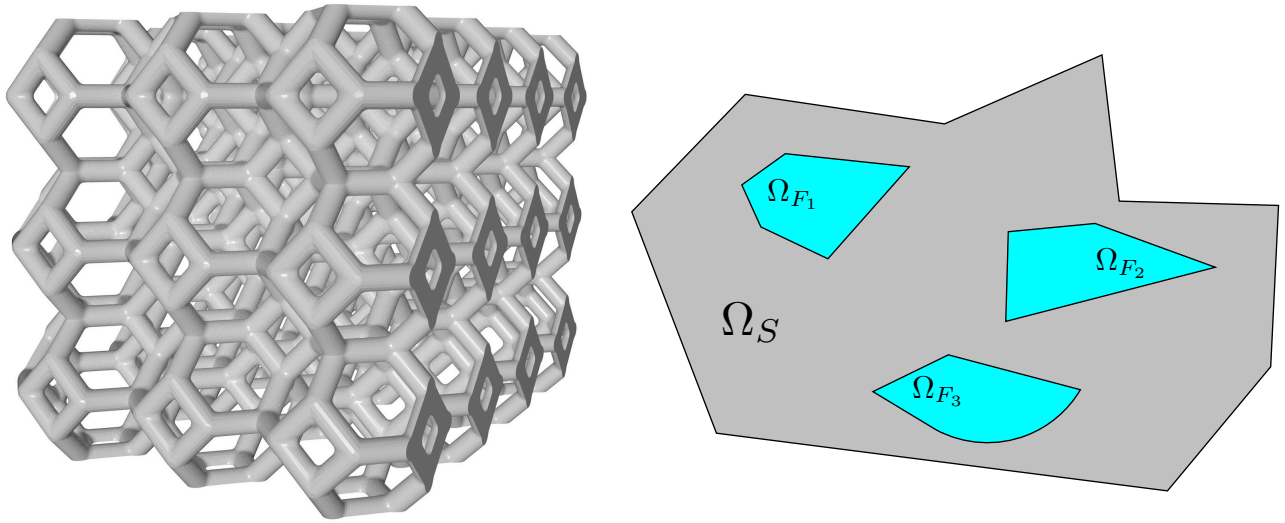


FIGURE 3.2 – Illustration d’un milieu poreux de type cellule de Kelvin (sources [60, 61]) et d’une représentation schématique avec différentes cavités fluides notées Ω_{F_i} et un milieu solide noté Ω_S .

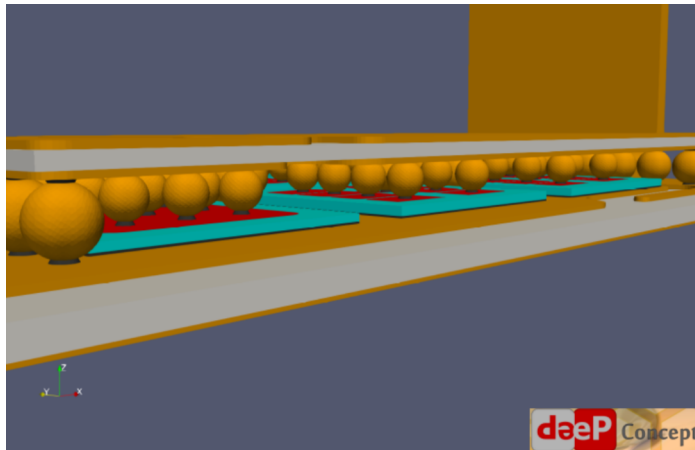


FIGURE 3.3 – Illustration d’une puce électronique développée par la start-up Deep Concept hébergée à la plateforme Prime à Tarbes lors d’un projet de R&D (avec l’autorisation de Deep Concept) et d’une représentation schématique composée d’un solide Ω_S limité par deux types de frontières : condition de Dirichlet sur $\partial\Omega_D$ et condition de Robin sur $\partial\Omega_{F^\infty}^D = \partial\Omega_{F^\infty} \setminus \partial\Omega_D$. Le solide est entouré d’un fluide englobant Ω_{F^∞} limité seulement par le solide.

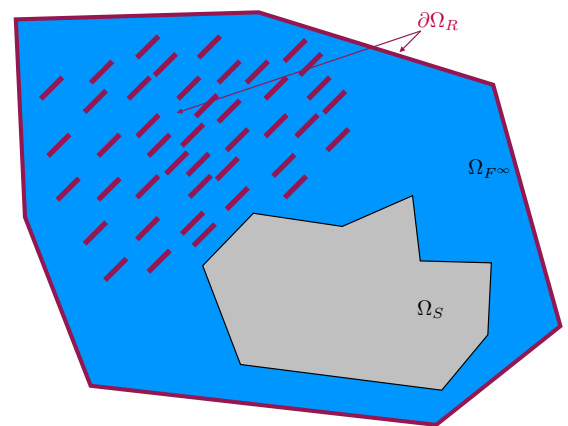


FIGURE 3.4 – Illustration d’une centrale solaire (source [62]) et d’une représentation schématique avec un solide Ω_S (le récepteur) entouré d’un fluide englobant Ω_{F^∞} et d’une frontière $\partial\Omega_R$ où la température radiative et/ou les propriétés de réflexion sont prescrites.

3.1.1 Rayonnement

Le mécanisme de rayonnement est considéré comme se propageant soit sous forme d'ondes électromagnétiques selon les équations de Maxwell, soit sous forme de photons selon Planck. Dans cette thèse, nous choisissons de ne parler que de photons tout en considérant le transfert radiatif comme instantané au vu de sa vitesse extrêmement élevée par rapport aux autres transferts de chaleurs.

Nous considérons le mode de transfert de chaleur par rayonnement présent à la fois dans le solide et dans le fluide : le système est entièrement semi-transparent. Nous retenons le modèle de l'équation de transfert radiatif (ETR) avec les deux restrictions suivantes :

- L'indice de réfraction est uniforme dans l'ensemble du système (pas de courbure des rayons au sein des solides, pas de refraction/reflexion aux interfaces solides/fluides). Cette hypothèse n'est faite que pour des raisons didactiques. Les écritures sont allégées mais aucune de nos conclusions ne seraient remises en cause en levant cette hypothèse.
- Nous utilisons une linéarisation de l'ETR autour de la luminance d'équilibre à une température T_{ref} (voir Annexe D). Cette hypothèse est fondamentale dans ce chapitre dédié à la thermique linéaire. Pour simplifier les écritures, nous remplaçons la luminance (la grandeur usuelle de l'ETR qui caractérise le rayonnement localement, dans une direction donnée, à une fréquence donnée, à un instant donné) par sa traduction en termes de température : la température de radiance $T_{R_{\vec{u}}}^\nu$ (utilisée surtout dans le domaine expérimental, aussi parfois appelée température de brillance (voir Annexe D)).

$T_{R_{\vec{u}}}^\nu(\vec{x}, t)$ caractérise le rayonnement monochromatique à l'emplacement \vec{x} , dans la direction \vec{u} , à la fréquence ν et instant t . Alors que l'ETR est prise au stationnaire, la température de radiance dépend du temps du fait du couplage avec les autres modes de transferts : elle s'ajuste instantanément au champ de température T (solide et fluide) et T évolue du fait de la conduction et de la convection qui sont instationnaires. En choisissant une écriture en température de radiance et grâce à la linéarisation, la source par émission dans l'ETR devient simplement le produit du coefficient d'absorption k_a^ν et de la température T , soit $k_a^\nu T$. Avec ce choix de notation et sous ces hypothèses, l'ETR s'écrit :

$$\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T_{R_{\vec{u}}}^\nu = -k_e^\nu T_{R_{\vec{u}}}^\nu + k_a^\nu T + k_s^\nu \int_{\mathbb{S}^2} p_S^\nu(\vec{u}|\vec{u}') du' T_{R_{\vec{u}'}}^\nu \quad (3.1)$$

où le coefficient d'absorption k_a^ν , le coefficient de diffusion k_s^ν , le coefficient d'extinction $k_e^\nu = k_a^\nu + k_s^\nu$ et la fonction de phase p_S^ν sont homogènes dans les cellules fluides (puisqu'elles sont supposées parfaitement brassées), peuvent être hétérogènes dans le solide, mais doivent être indépendants de la température (sinon le problème couplé devient non-linéaire). On note du l'angle solide autour de la direction \vec{u} et \mathbb{S}^2 est la sphère en dimension 3. Dans le système solide/fluide, la puissance radiative volumique $\psi \equiv \psi(\vec{x}, t)$ (absorption moins émission) s'écrit

$$\psi = \zeta \int_0^{+\infty} p_N(\nu) d\nu \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du (T_{R_{\vec{u}}}^\nu - T) \quad (3.2)$$

où $p_N(\nu) = \pi \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref}) / 4k_a^\nu \sigma T_{ref}^3$ est une densité de probabilité fréquentielle et $\zeta = 16k_a \sigma T_{ref}^3$ le coefficient de transfert radiatif linéarisé avec $k_a = \int_0^{+\infty} p_N(\nu) d\nu$ k_a^ν . Dans tout le chapitre (et d'ailleurs dans toute la thèse) nous supposons que le milieu est gris ce qui

nous permet de supprimer les dépendances fréquentielles (notamment dans (3.1)) et retenir

$$\begin{cases} \psi = \zeta (T_R - T) \\ T_R = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du T_{R,\vec{u}} \\ \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T_{R,\vec{u}} = -k_e T_{R,\vec{u}} + k_a T + k_s \int_{\mathbb{S}^2} p_S(\vec{u}|\vec{u}') du' T_{R,\vec{u}'} \end{cases} \quad (3.3)$$

La température T_R sera appelée la température radiative (l'intégrale angulaire de la température de radiance).

Pour fermer le problème, nous imposons la température de radiance incidente $T_{R,\partial\Omega_R,\vec{u}}$ (sur l'hémisphère rentrant du système $\vec{u} \in \mathbb{S}_+^2$) à une frontière fictive appelée $\partial\Omega_R$ qui englobe la totalité du système. Cette frontière peut être en contact avec le domaine fluide $\Omega_{F\infty}$, avec le domaine solide Ω_S ou avec une ou plusieurs cavités fluides Ω_{F_i} . Dans le cas où $\partial\Omega_R$ est en contact avec le solide ou une cavité fluide, cette frontière joue le rôle d'une paroi noire de température connue notée $T_{R,\partial\Omega_R}$: la frontière $\partial\Omega_R$ joue le rôle d'une condition de Dirichlet au contact du solide Ω_S , d'une condition de Robin au contact d'une cavité fluide et partout ailleurs, cette frontière est fictive et seul la température de radiance incidente y est imposée.

3.1.2 Conduction

La conduction est un mode de transfert de chaleur dans lequel les échanges d'énergie ont lieu dans les solides et les fluides sans déplacement de matière. Au sein d'un fluide, en présence de mouvement macroscopique, on parlera de convection. Ici, nous parlerons uniquement de conduction dans le milieu solide.

Le transfert par conduction se fait dès qu'il existe un gradient de température au sein du milieu matériel, noté Ω_S , depuis les régions chaudes vers les régions plus froides. A ce transfert diffusif est associé un vecteur densité surfacique de flux de chaleur \vec{j} , caractérisant le sens de propagation de la chaleur, décrit par la loi de Fourier. Cette loi a été établie expérimentalement et relie le vecteur \vec{j} et la température T_S du corps matériel :

$$\vec{j} = -\lambda \vec{\nabla} T_S \quad (3.4)$$

où λ est la conductivité thermique du matériau. Ainsi plus la conductivité du matériau est élevée, et plus la conduction tendra à uniformiser rapidement le champ de température.

Par un bilan d'énergie (issu du premier principe de la thermodynamique), nous établissons l'**équation de la chaleur** dans un solide semi-transparent, en présence d'un terme source radiatif,

$$\rho C \partial_t T_S = \underbrace{-\text{div}(-\lambda \vec{\nabla} T_S)}_{\text{échange conductif}} + \underbrace{\zeta (T_R - T_S)}_{\text{échange radiatif}} \quad (3.5)$$

où ρ et C sont la densité massique et la capacité calorifique du matériau, ζ ⁶ le coefficient de transfert de chaleur radiatif linéarisé et T_R la température radiative linéarisée. Les paramètres ρ , C , λ , et ζ peuvent être hétérogènes mais indépendants de la température.

6. le coefficient de transfert de chaleur radiatif linéarisé $\zeta = 16\sigma k_a T_{ref}^3$ où T_{ref} est une température de référence, k_a est le coefficient d'absorption pouvant être hétérogène mais indépendant de la température et σ est la constante de Stefan-Boltzmann.

Le milieu matériel considéré n'est pas forcément connexe et il est limité par une frontière notée $\partial\Omega_S$ où deux types de conditions aux limites peuvent être imposées :

- Dirichlet, $T_S = T_D$ sur le bord $\partial\Omega_D$ où l'on note T_D la température imposée,
- et Robin, $-\lambda\vec{n}\cdot\vec{\nabla}T_S = -\lambda\frac{\partial T_S}{\partial n} = h_F(T_F - T_S)$ sur le bord $\partial\Omega_S^D = \partial\Omega_S \setminus \partial\Omega_D$ où \vec{n} est la normale entrante à la surface solide $\partial\Omega_S$ et T_F la température du fluide.

La condition de Robin est considérée comme une condition de raccordement entre le solide et le fluide et est établie à partir de l'égalité des flux à l'interface solide-fluide. La condition initiale à l'instant t_I est notée T_I .

3.1.3 Convection

Le mécanisme de transfert de chaleur par convection correspond au transport de la chaleur par un fluide en mouvement. Nous considérons ici, dans un souci de généraliser les situations possibles d'un point de vue géométrique, un domaine fluide composé de m cavités, notées Ω_{F_i} , $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, et d'un domaine Ω_{F^∞} englobant, partiellement ou en totalité, le domaine solide Ω_S . Le domaine fluide n'est rien d'autre que la réunion de ces $m + 1$ domaines $\Omega_{F_1} \cup \Omega_{F_2} \cup \dots \cup \Omega_{F_m} \cup \Omega_{F^\infty}$.

Nous supposons que dans chaque cavité Ω_{F_i} , de volume \mathcal{V}_{F_i} , de surface $\partial\Omega_{F_i}$, la convection est modélisée non pas sous forme d'écoulement, mais comme un fluide parfaitement mélangé à chaque instant et échangeant avec les solides contigus par transfert convectif. Sous cette hypothèse, la température du fluide contenu dans la i ème cavité, notée T_{F_i} , est uniforme spatialement, et la densité massique ρ_i , la capacité calorifique C_i et le coefficient de transfert de chaleur radiatif linéarisé ζ_i sont uniformes. La considération d'un champ de vitesse au sein de la cavité fluide est une question délicate, dont une proposition réalisée par Loris Ibarrat est décrite dans [60].

La température du fluide, contenu dans la cavité englobante Ω_{F^∞} de surface $\partial\Omega_{F^\infty}$, est imposée, elle est notée T_{F^∞} et peut dépendre du temps.

Dans cette configuration, le fluide est considéré semi-transparent et le modèle de transfert convectif, qui n'a lieu qu'à travers la paroi fluide-solide, est décrit par un modèle de flux linéaire caractérisé par un coefficient d'échange convectif h_F pouvant être hétérogène (c'est à dire pouvant dépendre de la position et du temps). Un nouveau bilan d'énergie permet d'établir l'équation d'évolution de la température du fluide à l'intérieur de la i ème cavité,

$$\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i} \frac{dT_{F_i}}{dt}(t) = \underbrace{\zeta_i \int_{\Omega_{F_i}} (T_R(\vec{x}_R, t) - T_{F_i}(t)) d\vec{x}_R}_{\text{échange radiatif}} + \underbrace{\int_{\partial\Omega_{F_i}} h(\vec{y}_C) (T_S(\vec{y}_C, t) - T_{F_i}(t)) d\vec{y}_C}_{\text{échange convectif}} \quad (3.6)$$

3.1.4 Modèle conducto-convecto-radiatif

A présent nous considérons un modèle conducto-convecto-radiatif (tel que celui illustré Fig. 3.1), élaboré à partir des trois transferts de chaleurs décrits précédemment : la conduction, la convection et le rayonnement. Il est constitué d'un système entièrement semi-transparent, de domaine Ω constitué

- d'un domaine solide Ω_S de frontière $\partial\Omega_S = \partial\Omega_D \cup_{i=1}^m \partial\Omega_{F_i}^D \cup \partial\Omega_{F^\infty}^D$, de densité massique ρ , de capacité calorifique C et de conductivité λ uniformes, avec une condition de Dirichlet sur $\partial\Omega_D$ et une condition de Robin sur $\partial\Omega_{F^\infty}^D \cup_{i=1}^m \partial\Omega_{F_i}^D$,

- de m cavités fluides notées Ω_{F_i} de frontière $\partial\Omega_{F_i}$, de densité massique ρ_i , de capacité calorifique C_i , de coefficient d'échange convectif $h \equiv h(\vec{\mathbf{y}})$,
- et d'une cavité fluide englobante Ω_{F^∞} de frontière $\partial\Omega_{F^\infty}$ où la température T_{F^∞} est connue,

où le coefficient de transfert radiatif linéarisé est noté ζ et les trois transferts thermiques linéaires sont couplés. On notera T le champ de température spatio-temporel solution du système (3.7)

$$\begin{array}{l} \text{Solide} \\ \& \\ \text{Fluide} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} T = T_S, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \bar{\Omega}_S, t \in]t_I, +\infty[\\ T = T_{F_i}, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F_i}, t \in]t_I, +\infty[\\ T = T_{F^\infty}, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F^\infty}, t \in]t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (3.7a)$$

$$\begin{array}{l} \text{Solide} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \rho C \partial_t T_S = -\text{div}(-\lambda \vec{\nabla} T_S) + \zeta (T_R - T_S), \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}_S, t \in]t_I, +\infty[\\ T_S = T_I, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \bar{\Omega}_S, t = t_I \\ T_S = T_D, \quad \vec{\mathbf{y}} \in \partial\Omega_D, t \in]t_I, +\infty[\\ T_S = T_{R, \partial\Omega_R}, \quad \vec{\mathbf{y}} \in \partial\Omega_R, t \in]t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\partial T_S}{\partial n} = h_F (T_{F_i} - T_S), \quad \vec{\mathbf{y}} \in \partial\Omega_{F_i}^D, t \in]t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\partial T_S}{\partial n} = h_F (T_{F^\infty} - T_S), \quad \vec{\mathbf{y}} \in \partial\Omega_{F^\infty}^D, t \in]t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (3.7b)$$

$$\begin{array}{l} \text{Fluide} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i} \frac{dT_{F_i}}{dt} = \zeta_i \int_{\Omega_{F_i}} (T_R(\vec{\mathbf{x}}_R, t) - T_{F_i}(t)) d\vec{\mathbf{x}}_R, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F_i}, t \in]t_I, +\infty[\\ + \int_{\partial\Omega_{F_i} \cap \partial\Omega_S} h_F(\vec{\mathbf{y}}_S) (T_S(\vec{\mathbf{y}}_S, t) - T_{F_i}(t)) d\vec{\mathbf{y}}_S \\ + \int_{\partial\Omega_{F_i} \cap \partial\Omega_D} h_F(\vec{\mathbf{y}}_S) (T_D(\vec{\mathbf{y}}_S, t) - T_{F_i}(t)) d\vec{\mathbf{y}}_S \\ + \int_{\partial\Omega_{F_i} \cap \partial\Omega_R} h_F(\vec{\mathbf{y}}_S) (T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{\mathbf{y}}_S, t) - T_{F_i}(t)) d\vec{\mathbf{y}}_S \\ T_{F_i} = T_I, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F_i}, t = t_I \end{array} \right. \quad (3.7c)$$

$$\begin{array}{l} \text{Solide} \\ \& \\ \text{Fluide} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} T_R(\vec{\mathbf{x}}, t) = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du T_{R_{\vec{\mathbf{u}}}}(\vec{\mathbf{x}}, t), \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}, t \in]t_I, +\infty[\\ \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\nabla} T_{R_{\vec{\mathbf{u}}}} = -k_e T_{R_{\vec{\mathbf{u}}}} + k_a T + k_s \int_{\mathbb{S}^2} p_S(\vec{\mathbf{u}}|\vec{\mathbf{u}}') du' T_{R_{\vec{\mathbf{u}}'}}, \quad \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}, \vec{\mathbf{u}} \in \mathbb{S}^2, t \in]t_I, +\infty[\\ T_{R_{\vec{\mathbf{u}}}} = T_{R, \partial\Omega_R, \vec{\mathbf{u}}}, \quad \vec{\mathbf{y}} \in \partial\Omega_R, \vec{\mathbf{u}} \in \mathbb{S}_+^2, t \in]t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (3.7d)$$

où l'indice $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, $k_e = k_a + k_s$ est le coefficient d'extinction et $\partial\Omega_R$ est une frontière fictive contenant au moins $\partial\Omega$ (en particulier on a $\Omega_R = \Omega$). On note l'adhérence $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$, l'intérieur $\overset{\circ}{\Omega} = \Omega \setminus \partial\Omega$ et la sphère en dimension trois \mathbb{S}^2 (où \mathbb{S}_+^2 est l'hémisphère entrant au domaine). Rappelons que $\partial\Omega_J^D = \partial\Omega_J \setminus \partial\Omega_D$ avec Ω_J un domaine quelconque.

A ce stade, il n'est pas naturel d'exprimer la température $T(\vec{\mathbf{x}}, t)$ à une position $\vec{\mathbf{x}}$ à l'instant t , solution du système 3.7 comme une espérance ni même d'imaginer voire élaborer

un espace de chemins associé à T . Nous présentons dans les deux prochaines sections deux méthodes permettant de construire cette espérance : la méthode de Green basée sur l'idée de propagation d'une densité transportant l'information des conditions aux limites et des sources qui contribuent à la valeur de la température et la théorie des Processus Stochastiques où la notion de trajectoire sera introduite permettant la construction d'un espace de chemins.

3.2 Méthode des fonctions de Green

Dans cette section, nous proposons une introduction à la méthode des fonctions de Green (appelée parfois méthode de Green), en commençant par rappeler les fondements principaux de la méthode, tout en essayant de donner dès que possible des images physiques associées au phénomène de propagation. Nous présentons ensuite comment employer cette méthode afin d'exprimer la grandeur comme une intégrale élaborée à partir des conditions aux limites⁷ et des sources, cette intégrale pouvant être ensuite reformulée en une espérance, et permettre l'élaboration d'un Monte-Carlo. Dans la section 3.2.2, nous appliquerons cette stratégie de résolution dans le but d'exprimer la température T comme une espérance.

3.2.1 Introduction aux fonctions de Green

3.2.1.1 Description du système différentiel linéaire

Formellement, la méthode des fonctions de Green est un moyen systématique permettant d'exprimer sous une forme intégrale la solution d'une équation aux dérivées partielles linéaire associée à des conditions aux limites et initiale, s'écrivant,

$$\begin{cases} L(f)(\vec{x}, t) = f_S(\vec{x}, t) & , t \in [t_I, +\infty[, \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega} \\ L_{\partial\Omega}(f)(\vec{y}, t) = f_{\partial\Omega}(\vec{y}, t) & , t \in]t_I, +\infty[, \vec{y} \in \partial\Omega \\ f(\vec{x}, t_I) = f_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \bar{\Omega} \end{cases} \quad (3.8)$$

où

- Ω est le domaine, de frontière $\partial\Omega$, d'adhérence $\bar{\Omega}$ et d'intérieur $\overset{\circ}{\Omega}$,
- $L(f)(\vec{x}, t)$ et $L_{\partial\Omega}(f)(\vec{y}, t)$ sont des opérateurs différentiels linéaires (agissant sur f),
- pour faciliter la lecture, la variable spatiale sera notée \vec{x} à l'intérieur du domaine et \vec{y} sur la frontière,
- t la variable temporelle,
- f_S est une source volumique (de la même dimension que f),
- $f_{\partial\Omega}$ est une condition de bord,
- et f_I la condition initiale à l'instant t_I .

Cette méthode repose sur les deux idées fondamentales suivantes

1. La valeur de la grandeur f à la position \vec{x} à l'instant t résulte de la propagation des conditions aux limites et des sources (i.e f_S , $f_{\partial\Omega}$ et f_I , appelées contributions) jusqu'au point d'observation (\vec{x}, t) , cette propagation étant décrite par un objet mathématique appelé *fonctions de Green* (FG), généralement noté G .

7. En généralisant, on considère que les "conditions aux limites" sont les conditions de bord et la condition initiale

2. La construction de G ne dépend que des opérateurs différentiels L et $L_{\partial\Omega}$ et est indépendante de la valeur des conditions aux limites et sources imposées.

Techniquement, cette méthode consiste à réécrire l'ensemble des conditions aux limites et des sources à partir de la distribution de Dirac et de l'opérateur de convolution. La linéarité de l'équation, induisant le principe de superposition, permet alors de penser ces impulsions de Dirac comme se propageant ou se diffusant de façon indépendante les une des autres. Sa proposition consiste ensuite à élaborer un outil permettant de propager une impulsion en un point quelconque du domaine jusqu'au point d'observation, dans le but de reconstruire par superposition la solution f (voir [37] pour de plus amples explications).

3.2.1.2 Fonction de Green

L'outil proposé par Green est appelé fonction de Green et est défini à l'aide de l'EDP suivante :

$$\begin{cases} L(G)(\vec{x}, t|\vec{x}', t') = \delta(\vec{x} - \vec{x}')\delta(t - t'), & t \in]t_I, +\infty[, t' \in \mathbb{R}, \vec{x} \in \bar{\Omega}, \vec{x}' \in \bar{\Omega} \\ L_{\partial\Omega}(G)(\vec{x}, t|\vec{y}, t') = 0, & t \in]t_I, +\infty[, t' \in \mathbb{R}, \vec{x} \in \bar{\Omega}, \vec{y} \in \partial\Omega \\ G(\vec{x}, t|\vec{x}', t') = 0, & t < t', \vec{x} \in \bar{\Omega}, \vec{x}' \in \bar{\Omega} \end{cases} \quad (3.9)$$

où la source volumique a été remplacée par une impulsion de Dirac en temps et espace et où les conditions de bord ont été rendues homogènes, i.e. avec un second membre nul. Dans cette équation, $G(\vec{x}, t|\vec{x}', t')$ est interprétée comme propageant l'information du point $(\vec{x}', t') \in \bar{\Omega} \times \mathbb{R}$ jusqu'au point (\vec{x}, t) . La dernière équation du système (3.9) est appelée Causalité et permet de fermer le problème en définissant une condition initiale (qui n'est rien d'autre que $G(\vec{x}, t|\vec{x}', t) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$). Elle est imposée de façon intuitive et signifie simplement que l'effet en (\vec{x}, t) est engendré par la cause en (\vec{x}', t') , la propagation ne pouvant avoir lieu que dans le sens positif du temps. Une illustration de cette propagation est proposée dans la Figure 3.5 où nous avons choisi de décrire seulement trois contributions ponctuelles : la condition initiale au point \vec{x}_I , la condition de bord au point \vec{y} à l'instant $t_{\partial\Omega}$ et la source au point \vec{x}_S à l'instant t_S .

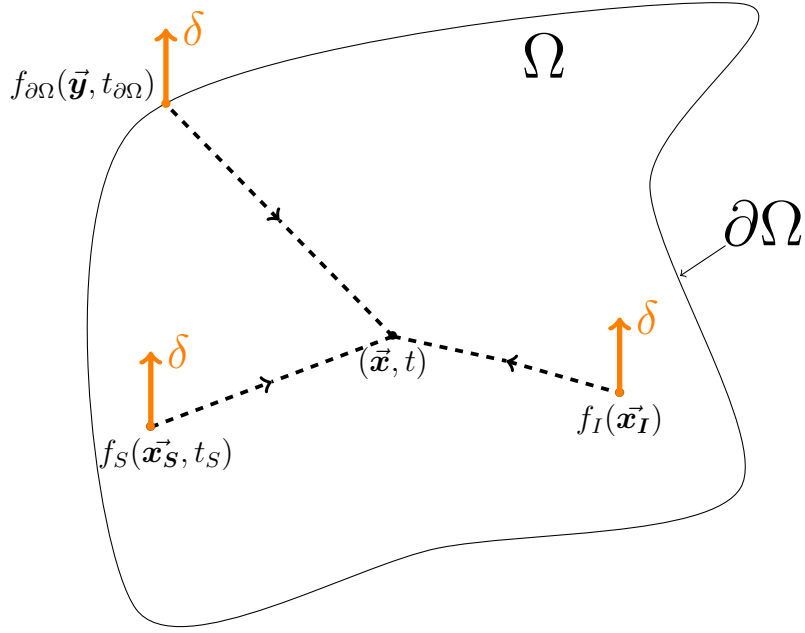


FIGURE 3.5 – Illustration de la propagation de l’information, partant de l’ensemble des conditions aux limites et sources (ici seulement trois contributions sont illustrées) jusqu’au point d’observation noté (\vec{x}, t) . Les réalisations de \mathcal{F} sont illustrées via des traits en pointillés.

3.2.1.3 Méthode de Green et Monte-Carlo

Méthode des fonctions de Green

Une fois le propagateur déterminé, la grandeur f peut être exprimée comme la solution d’une équation intégrale élaborée à partir de G , des conditions aux limites et des sources.

$$\begin{aligned}
 f(\vec{x}, t) = & \int_{\Omega} dx_I G(\vec{x}, t | \vec{x}_I, t_I) f_I(\vec{x}_I) \\
 & + \int_{\partial\Omega} dy \int_{t_I}^t dt_{\partial\Omega} G_{\partial\Omega}(\vec{x}, t | \vec{y}, t_{\partial\Omega}) f_{\partial\Omega}(\vec{y}, t_{\partial\Omega}) \\
 & + \int_{\Omega} dx_S \int_{t_I}^t dt_S G(\vec{x}, t | \vec{x}_S, t_S) f_S(\vec{x}_S, t_S)
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

où la fonction $G_{\partial\Omega}$ est définie à partir de G selon les opérateurs L et $L_{\partial\Omega}$. Comme il n’existe pas d’expression générale de $G_{\partial\Omega}$, cela sera traité au cas par cas dans la suite.

Lecture de l’expression intégrale

En accord avec l’idée première de Green, la lecture de cette équation est "directe" : la grandeur f au point \vec{x} à l’instant t résulte de la propagation de

- la condition initiale f_I , en tout point $\vec{x}_I \in \Omega$ à l’instant t_I ,

— des condition de bord $f_{\partial\Omega}$ en tout point $\vec{y} \in \partial\Omega$ et à tout temps $t_{\partial\Omega} \in [t_I, t]$,
— et des sources f_S en tout point $\vec{x}_S \in \Omega$ et à tout temps $t_S \in [t_I, t]$,
jusqu'au point \vec{x} à l'instant t via la fonction de Green.

Reformulation intégrale probabiliste

Nous réalisons ensuite un travail de reformulation, avec comme objectif d'écrire f sous une formulation intégrale induisant une lecture probabiliste,

$$\begin{aligned} f(\vec{x}, t) = & p_I(\vec{x}, t|t_I) \int_{\Omega} p_{\vec{X}_I}(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I) dx_I f_I(\vec{x}_I) \\ & + p_{\partial\Omega}(\vec{x}, t|t_I) \int_{\partial\Omega} \int_{t_I}^t p_{(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega})}(\vec{x}, t|\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega}) dy_{\partial\Omega} dt_{\partial\Omega} f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega}) \\ & + p_S(\vec{x}, t|t_I) \int_{\Omega} \int_{t_I}^t p_{(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S)}(\vec{x}, t|\vec{x}_S, t_S) dx_S dt_S f_S(\vec{x}_S, t_S) \end{aligned} \quad (3.11)$$

et enfin comme une espérance,

$$f = \mathbb{E}_{\mathcal{F}}(\mathcal{F}) \quad (3.12)$$

avec,

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \mathcal{B}(p_I) f_I(\vec{X}_I) \\ +(1 - \mathcal{B}(p_I))\mathcal{B}(p_{\partial\Omega}) f_{\partial\Omega}(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega}) \\ +(1 - \mathcal{B}(p_I))(1 - \mathcal{B}(p_{\partial\Omega}))\mathcal{B}(p_S) f_S(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

où

- la somme $p_I + p_{\partial\Omega} + p_S$ est égale à 1, chaque élément pouvant donc être considéré comme une probabilité,
- $\mathcal{B}(p)$ suit une loi de Bernoulli de paramètre p ,
- $p_I \equiv p_I(\vec{x}, t|t_I) = \int_{\Omega} d\vec{x}_I G(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I)$ et $p_{\vec{X}_I}(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I) = G(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I)/p_I(\vec{x}, t|t_I)$ est la densité de probabilité associée,
- $p_{\partial\Omega} \equiv p_{\partial\Omega}(\vec{x}, t|t_I) = \int_{\partial\Omega} dy_{\partial\Omega} \int_{t_I}^t dt_{\partial\Omega} G_{\partial\Omega}(\vec{x}, t|\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega})$ et $p_{(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega})}(\vec{x}, t|\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega}) = G_{\partial\Omega}(\vec{x}, t|\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega})/p_{\partial\Omega}(\vec{x}, t|t_I)$ est la densité de probabilité associée,
- $p_S \equiv p_S(\vec{x}, t|t_I) = \int_{\Omega} dx_S \int_{t_I}^t dt_S G(\vec{x}, t|\vec{x}_S, t_S)$ et $p_{(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S)}(\vec{x}, t|\vec{x}_S, t_S) = G_S(\vec{x}, t|\vec{x}_S, t_S)/p_S(\vec{x}, t|t_I)$ est la densité de probabilité associée,
- \vec{X}_I est une v.a. de densité de probabilité $p_{\vec{X}_I}$,
- $(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega})$ est un couple de v.a. de loi conjointe $p_{(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega})}$,
- $(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S)$ est un couple de v.a. de loi conjointe $p_{(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S)}$.

La formulation intégrale (3.11) est définie à partir de trois probabilités : la probabilité p_I de transporter une condition initiale, la probabilité $p_{\partial\Omega}$ de transporter une condition de bord et la probabilité p_S de transporter une source volumique, auxquelles sont associées les densités de probabilité $p_{\vec{X}_I}$, $p_{(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega})}$ et $p_{(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S)}$.

Algorithme de Monte-Carlo

Finalement, avec cette écriture, l'algorithme d'échantillonnage de \mathcal{F} se conçoit sans difficulté : on échantillonne le type de condition aux limites propagé suivant les probabilités p_I , $p_{\partial\Omega}$ et p_S , puis on échantillonne une position et un temps suivant la densité de répartition, et on retient comme poids de la contribution la condition à la limite ou la source à la position et au temps correspondant. La grandeur f est alors estimée par la moyenne arithmétique d'un grand nombre de ces poids. L'algorithme d'échantillonnage de \mathcal{F} est décrit dans l'Algorithme 3.

Algorithme 3 : Echantillonnage de \mathcal{F} à la position \vec{x} à l'instant t .

```

1 Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme sur  $[0, 1]$ ;
2 if  $r < p_I$  then
3   | Échantillonner  $\vec{x}_I$  suivant la loi de  $\vec{X}_I$ ;
4   |  $w = f_I(\vec{x}_I)$ ;
5 else if  $p_I < r < p_I + p_{\partial\Omega}$  then
6   | Échantillonner  $(\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega})$  suivant la loi conjointe de  $(\vec{Y}_{\partial\Omega}, \mathcal{T}_{\partial\Omega})$ ;
7   |  $w = f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{\partial\Omega}, t_{\partial\Omega})$ ;
8 else
9   | Échantillonner  $(\vec{x}_S, t_S)$  suivant la loi conjointe de  $(\vec{X}_S, \mathcal{T}_S)$ ;
10  |  $w = f_S(\vec{x}_S, t_S)$ ;

```

3.2.1.4 Mise en œuvre de la Méthode de Green

Une mise en œuvre de cette démarche est proposée dans l'exemple académique suivant :

Exemple illustratif de mise en oeuvre de la méthode des fonctions de Green :

Considérons l'équation différentielle ordinaire suivante :

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = -\alpha(y - S), & t \in]t_I, +\infty[\\ y(t_I) = y_I \end{cases} \quad (3.14)$$

où α est une constante et $S \equiv S(t)$ est une fonction du temps appelée source. La fonction de Green $G \equiv G(t|t_S)$ de l'Eq. (3.14), propageant une impulsion de l'instant t_S jusqu'à l'instant t est solution de l'équation suivante :

$$\frac{dG}{dt}(t|t_S) = -\alpha G(t|t_S) + \delta(t - t_S), \quad t \in]t_I, +\infty[, t_S \in \mathbb{R} \quad (3.15)$$

La méthode de Green permet d'exprimer la valeur de y à l'instant t comme la résultante de la propagation de l'ensemble des conditions aux limites et sources : la condition initiale y_I est propagée de t_I jusqu'à t et la source αS est propagée à tous les instants $t_S \in]t_I, t]$ jusqu'à t . Formellement, on obtient l'expression de y suivante :

$$y(t) = G(t|t_I)y_I + \int_{t_I}^t G(t|t_S)\alpha S(t_S)dt_S \quad (3.16)$$

Il est intéressant de remarquer que la connaissance de G est suffisante à l'évaluation de y quelles que soient les valeurs de la condition initiale y_I et de la source S . Cette propriété est générale, et fait de la FG un outil d'analyse performant lors de l'étude de systèmes et équations linéaires puisqu'elle permet, à elle seule, de caractériser entièrement la dynamique des solutions du problème.

Via une reformulation, on obtient,

$$y(t) = G(t|t_I)y_I + (1 - G(t|t_I)) \int_{t_I}^t \alpha \frac{G(t|t_S)}{1 - G(t|t_I)} S(t_S) dt_S \quad (3.17)$$

que l'on réécrit,

$$y(t) = p_I(t|t_I)y_I + p_S(t|t_I) \int_{t_I}^t p_{\mathcal{T}_S}(t|t_S) S(t_S) dt_S \quad (3.18)$$

où $p_I(t|t_I) = G(t|t_I)$, $p_S(t|t_I) = 1 - G(t|t_I)$ et $p_{\mathcal{T}_S}(t|t_S) = \alpha G(t|t_S)/(1 - G(t|t_I))$. Il devient naturel d'exprimer y comme une espérance,

$$y = \mathbb{E}_Y(Y) \quad (3.19)$$

où

$$Y(t) = \mathcal{B}(p_I(t|t_I))y_I + (1 - \mathcal{B}(p_I(t|t_I))) S(\mathcal{T}_S) \quad (3.20)$$

avec \mathcal{B} une v.a. de Bernoulli et \mathcal{T}_S une v.a. de densité de probabilité $p_{\mathcal{T}_S}$. L'algorithme d'échantillonnage de Y est décrit dans l'Algorithme 4

Algorithme 4 : Mise en oeuvre de la méthode des fonctions de Green.

```

1 Échantillonner  $r$  uniformément sur  $[0, 1]$ ;
2 if  $r < p_I(t|t_I)$  then
3   |  $w = y_I$ ;
4 else
5   | Échantillonner  $t_S$  suivant  $\mathcal{T}_S$ ;
6   |  $w = S(t_S)$ ;

```

Pour déterminer les valeurs de p_I , p_S et $p_{\mathcal{T}_S}$, il suffit de calculer G . Dans le cas présent il suffit de remarquer d'après l'Eq. (3.15), que pour $t > t_S$ il existe une constante c telle que $G(t|t_S) = c \exp(-\alpha t)$, en utilisant le principe de Causalité, ($\forall s_1, s_2 \in \mathbb{R}^2$, si $s_1 < s_2$ alors $G(s_1|s_2) = 0$ et $G(s_1|s_1) = 1$), on en déduit que $c = \exp(\alpha t_S)$ et donc que $G(t|t_S) = \mathcal{H}(t \geq t_S) \exp(-\alpha(t - t_S))$.

3.2.2 Méthode de Green et Transfert Thermique Linéaire

Dans cette section, nous mettons en oeuvre la méthode des fonctions de Green dans le but d'écrire la température T solution de l'équation (3.7) comme une espérance.

La température T est exprimée comme une fonction des températures T_S et T_{F_i} solutions du modèle (3.7), constitué de trois équations couplées décrivant les trois modes de transfert de chaleur qui sont la conduction (3.7b), la convection (3.7c) et le rayonnement (3.7d). Pour simplifier le développement de la méthode, nous allons procéder par étapes, en commençant par construire les fonctions de Green et les formulations en espérances associées aux trois températures T_{F_i} , T_S et T_R , puis nous verrons comment les combiner pour écrire T comme

une seule espérance.

Dans les trois sous-sections suivantes, les températures dans les domaines Ω_B , notées T_B , sont exprimées comme des espérances $T_B = \mathbb{E}_{\Theta_B}(\Theta_B)$, où les variables aléatoires Θ_B sont définies à partir des probabilités $p_A^B \equiv p_A^B(x, t|t_I)$ qui dépendent d'un point $\vec{x} \in \Omega_B$, et des deux instants $t \in [t_I, t[$ et t_I ; Ces probabilités sont interprétées comme transportant l'information de la température T_A . Le symbole B en indice supérieur peut prendre les valeurs S pour le solide, F_i pour les cavités fluides et R pour le domaine tout entier. Le symbole A en indice peut prendre les valeurs

- I pour la température initiale,
- R pour la température radiative,
- S pour la température du solide,
- D pour la température imposée à la frontière $\partial\Omega_D$,
- F_i pour la température de la i ème cavité fluide,
- F^∞ pour la température de la cavité englobante,
- et $R, \partial\Omega_R$ pour la température radiative imposée à la frontière $\partial\Omega_R$.

Il est important de remarquer, que les températures T_B et les lettres A et B ne sont pas des variables aléatoires, malgré le fait qu'elles soient écrites en majuscules.

A chacune de ces probabilités p_A^B , sera associée une fonction de Green notée G_B et si nécessaire un couple de variable aléatoire noté $(\vec{Z}_A^B, \mathcal{T}_A^B)$ de densité de probabilité $(p_{\vec{Z}_A^B}, p_{\mathcal{T}_A^B})$. Ce couple de variables aléatoires permet d'échantillonner la position \vec{z}_A^B et le temps t_A^B permettant d'identifier la valeur de la température $T_A(\vec{z}_A^B, t_A^B)$ contribuant au poids de Monte-Carlo. La lettre Z prendra les valeurs X dans le cas d'une densité volumique, et Y dans le cas d'une densité surfacique.

3.2.2.1 Fonction de Green pour la Convection dans le fluide Ω_F

Le modèle de convection (3.7c) se présente sous la forme d'une équation différentielle ordinaire linéaire (une EDO de structure similaire à celle présentée dans l'exemple précédent, Eq. (3.14)). Par conséquent, la température du fluide T_{F_i} à l'intérieur de la i ème cavité, peut être exprimée sous une formulation intégrale en utilisant la fonction de Green. Pour simplifier la démarche, nous choisissons d'alléger les notations en considérant un paramètre h_F uniforme, indépendant du temps (la dépendance temporelle ne pose aucune difficulté, l'hétérogénéité spatiale du coefficient h_F est prise en compte via un algorithme à collision nulle).

Par définition, la fonction de Green $G_{F_i} \equiv G_{F_i}(t|t')$ propageant une impulsion de type Dirac dans $\overset{\circ}{\Omega}_{F_i}$ de l'instant t' jusqu'à l'instant t , est solution de l'équation (3.21).

$$\begin{cases} \frac{dG_{F_i}}{dt} = -\frac{(\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i})}{\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i}} G_{F_i} + \delta(t - t') , & t \geq t' \\ G_{F_i} = 0 , & t < t' \end{cases} \quad (3.21)$$

La solution G_{F_i} est bien connue quelque soit la cavité fluide Ω_{F_i} et vérifie : $G_{F_i}(t|t') = \exp(-\nu(t - t')) \mathcal{H}(t \geq t')$ où $\nu = (\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}) / (\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i})$.

Pour exprimer la température T_{F_i} à partir de G_{F_i} , il suffit de multiplier l'équation (3.21) par T_{F_i} , de multiplier l'équation (3.7c) par G_{F_i} , de calculer la différence de ces deux équations, d'intégrer entre t_I et t , et enfin d'utiliser la propriété de Causalité pour obtenir l'expression suivante,

$$\begin{aligned} T_{F_i}(t) &= G_{F_i}(t|t_I) T_I \\ &+ \int_{t_I}^t dt_R G_{F_i}(t|t_R) \int_{\Omega_{F_i}} d\vec{\mathbf{x}}_R \frac{\zeta_i}{\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i}} T_R(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R) \\ &+ \int_{t_I}^t dt_S G_{F_i}(t|t_S) \int_{\partial\Omega_{F_i}} d\vec{\mathbf{y}}_S \frac{h}{\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i}} T_S(\vec{\mathbf{y}}_S, t_S) \end{aligned} \quad (3.22)$$

On retrouve alors la proposition de Green, qui consiste à exprimer la température du fluide à partir des conditions aux limites, des sources et du propagateur G_{F_i} :

- La température initiale T_I est propagée de l'instant t_I jusqu'à l'instant t .
- La température radiative T_R est propagée de tous les instants $t_R \in]t_I, t[$ jusqu'à l'instant t , de tous points $\vec{\mathbf{x}}_R$ du volume fluide.
- La température de bord T_S est propagée de tous les instants $t_S \in]t_I, t[$ jusqu'à l'instant t , de tous points $\vec{\mathbf{y}}_S$ de l'interface fluide/solide.

Un travail de reformulation permet d'exprimer la température sous une formulation intégrale induisant une lecture probabiliste,

$$\begin{aligned} T_{F_i}(t) &= G_{F_i}(t|t_I) T_I \\ &+ (1 - G_{F_i}(t|t_I)) \frac{\zeta_i \mathcal{V}_{F_i}}{\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}} \int_{t_I}^t dt_R \frac{\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}}{\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i}} \frac{G_{F_i}(t|t_R)}{1 - G_{F_i}(t|t_I)} \int_{\Omega_{F_i}} \frac{1}{\mathcal{V}_{F_i}} d\vec{\mathbf{x}}_R T_R(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R) \\ &+ (1 - G_{F_i}(t|t_I)) \frac{h \mathcal{S}_{F_i}}{\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}} \int_{t_I}^t dt_S \frac{\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}}{\rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i}} \frac{G_{F_i}(t|t_S)}{1 - G_{F_i}(t|t_I)} \int_{\partial\Omega_{F_i}} \frac{1}{\mathcal{S}_{F_i}} d\vec{\mathbf{y}}_S T_S(\vec{\mathbf{y}}_S, t_S) \end{aligned} \quad (3.23)$$

que l'on réécrit,

$$T_{F_i}(t) = \left(\begin{array}{l} p_I^{F_i}(t|t_I) T_I \\ + p_R^{F_i}(t|t_I) \int_{\Omega_F} \int_{t_I}^t p_{(\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i})}(t|\vec{\mathbf{x}}_R, t_R) d\vec{\mathbf{x}}_R dt_R T_R(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R) \\ + p_S^{F_i}(t|t_I) \int_{\partial\Omega_F} \int_{t_I}^t p_{(\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i})}(t|\vec{\mathbf{y}}_S, t_S) d\vec{\mathbf{y}}_S dt_S T_S(\vec{\mathbf{y}}_S, t_S) \end{array} \right) \quad (3.24)$$

puis comme une espérance,

$$T_{F_i} = \mathbb{E}_{\Theta_{F_i}}(\Theta_{F_i}) \quad (3.25)$$

avec

$$\Theta_{F_i}(\vec{\mathbf{x}}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_I^{F_i}) T_I \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^{F_i})) \mathcal{B}(p_R^{F_i}) T_R(\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^{F_i})) (1 - \mathcal{B}(p_R^{F_i})) T_S(\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i}) \end{array} \right) \quad (3.26)$$

où

- $p_I^{F_i} \equiv p_I^{F_i}(t|t_I) = G_{F_i}(t|t_I)$,
- $p_R^{F_i} \equiv p_R^{F_i}(t|t_I) = (1 - p_I^{F_i}(t|t_I)) (\zeta \mathcal{V}_{F_i} / (\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}))$,
- $p_S^{F_i} \equiv p_S^{F_i}(t|t_I) = (1 - p_I^{F_i}(t|t_I)) (h \mathcal{S}_{F_i} / (\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}))$,

- $p_{(\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i})}(t|\vec{\mathbf{x}}_R, t_R) = \left(\frac{1}{\nu_{F_i}}, \nu G_{F_i}(t|t_R)/(1 - p_I^{F_i}(t|t_I)) \right)$,
- $p_{(\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i})}(t|\vec{\mathbf{y}}_S, t_S) = \left(\frac{1}{s_{F_i}}, \nu G_{F_i}(t|t_S)/(1 - p_I^{F_i}(t|t_I)) \right)$,
- $\nu = (\zeta_i \mathcal{V}_{F_i} + h \mathcal{S}_{F_i}) / \rho_i C_i \mathcal{V}_{F_i}$,
- $\mathcal{B}(p)$ une loi de Bernoulli de paramètre p ,
- $\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}$ suit une loi uniforme dans le volume Ω_{F_i} ,
- $\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}$ suit une loi uniforme sur la surface $\partial\Omega_{F_i}$,
- $\mathcal{T}_R^{F_i} = \mathcal{T}_S^{F_i}$ sont deux variables aléatoires de densité de probabilité $p_{\mathcal{T}_R^{F_i}} = p_{\mathcal{T}_S^{F_i}}$ à valeurs dans $[t_I, t]$.

Cette formulation est définie à partir des trois probabilités, la probabilité $p_I^{F_i}$ de transporter la température initiale, la probabilité $p_R^{F_i}$ de transporter la température radiative et la probabilité $p_S^{F_i}$ de transporter la température de bord (la température du solide). Pour déterminer quelle contribution est transportée, est associée à chacune de ces probabilités une densité de répartition $p_{(\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i})}$ et $p_{(\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i})}$ (sauf pour la condition initiale car la température dans le fluide étant uniforme, la condition initiale dans le fluide l'est également).

Finalement, l'algorithme d'échantillonnage de Θ_{F_i} s'écrit : on échantillonne le type de condition aux limites transporté suivant les probabilités $p_I^{F_i}$, $p_R^{F_i}$ et $p_S^{F_i}$, puis on échantillonne une position $\vec{\mathbf{x}}'$ et un temps t' suivant la densité de répartition, la contribution au poids de MC étant la température au point $(\vec{\mathbf{x}}', t')$. L'algorithme d'échantillonnage de Θ_{F_i} est décrit dans l'Algorithme 5.

Algorithme 5 : Fonction $F_{\Theta_{F_i}}(\vec{\mathbf{x}}, t)$ d'échantillonnage de Θ_{F_i} à la position $\vec{\mathbf{x}}$ au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans la fonction F_{Θ_R} au point $(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R)$ où de F_{Θ_S} point $(\vec{\mathbf{y}}_S, t_S)$.

```

1 Échantillonner  $r$  suivant la loi uniforme sur  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
2 if  $r < p_I^{F_i}$  then
3   |  $w = T_I$ ;
4 else if  $r < p_I^{F_i} + p_R^{F_i}$  then
5   | Échantillonner  $(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R)$  suivant  $(\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i})$ ;
6   |  $w = F_{\Theta_R}(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R)$ ;
7 else
8   | Échantillonner  $(\vec{\mathbf{y}}_S, t_S)$  suivant  $(\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i})$ ;
9   |  $w = F_{\Theta_S}(\vec{\mathbf{y}}_S, t_S)$ ;

```

Les températures T_R et T_S sont a priori inconnues et nous les reportons (principe de double randomisation) dans un appel aux fonctions F_{Θ_R} et F_{Θ_S} associées aux v.a. Θ_R et Θ_S que nous définirons ci-après. Dans la suite, nous schématiserons les différentes réalisations de Θ_{F_i} de la façon suivante :

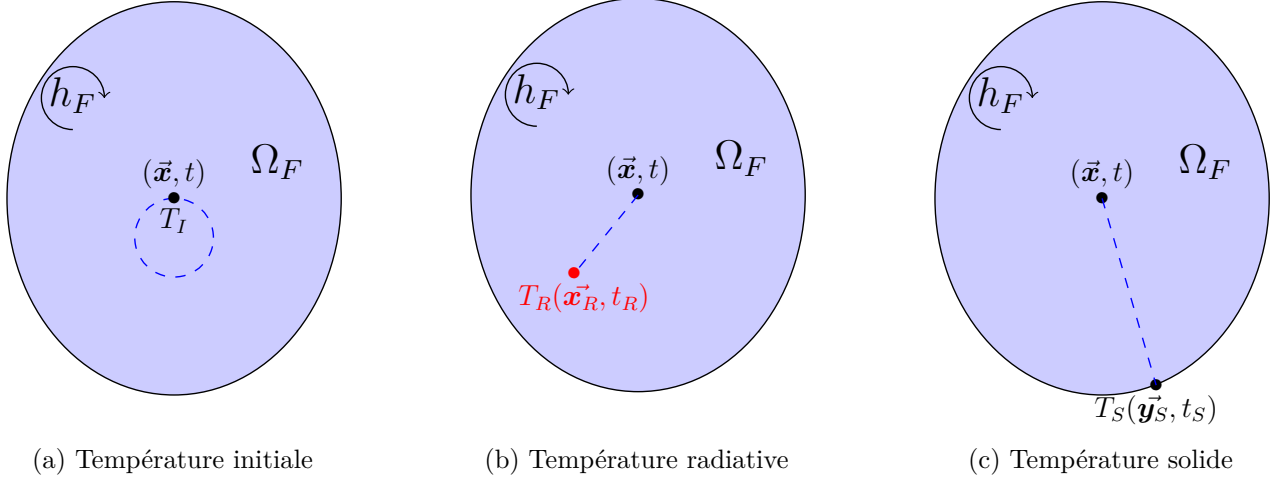


FIGURE 3.6 – Illustration de trois réalisations selon Θ_{F_i} associées au transfert par convection, représentant les trois contributions pouvant être retournées : la température initiale T_I , la température radiative T_R et la température du solide T_S .

A ce stade, il est fondamental de remarquer que la fonction de Green G_{F_i} est connue analytiquement quelle que soit la complexité géométrique du domaine fluide Ω_{F_i} et le profil de température imposé au bord. Par conséquent, l'algorithme de Monte-Carlo 5 est fonctionnel pour n'importe quelle cavité (car nous avons toujours accès à toutes les probabilités et densités de probabilité définies à partir de G_{F_i}). Il est également intéressant de remarquer que la prise en compte d'un coefficient d'échange convectif h_F hétérogène est géré via la technique des ACN (voir 4.1.1). Finalement, la température du fluide peut être résolue par MC sans aucune approximation dans n'importe quelle cavité.

3.2.2.2 Fonction de Green pour la Conduction dans le solide Ω_S

Le modèle de conduction étant linéaire, la température du solide T_S peut être exprimée sous une formulation intégrale via la fonction de Green $G_S \equiv G_S(\vec{x}, t | \vec{x}', t')$ propageant une impulsion de type Dirac du point (\vec{x}', t') au point (\vec{x}, t) , définie comme la solution de l'équation (3.27),

$$\begin{cases} \partial_t G_S = -\text{div}(-D\vec{\nabla}G_S) - \frac{\zeta}{\rho C}G_S + \delta(\vec{x} - \vec{x}')\delta(t - t') & , t \in]t_I, +\infty[, \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega}_S \\ G_S = 0 & , t \in]t_I, +\infty[, \vec{x} \in \partial\Omega_D \\ -D\frac{\partial G_S}{\partial n} = -\frac{h_F}{\rho C}G_S & , t \in]t_I, +\infty[, \vec{x} \in \partial\Omega_{F_i}^D \cup \partial\Omega_{F_i}^D \\ G_S = 0 & , t < t' \end{cases} \quad (3.27)$$

où $D = \lambda/\rho C$ est la diffusivité thermique du matériau solide.

Pour exprimer la température en un point du solide à un certain temps, à partir des conditions aux limites, des sources et du propagateur G_S , nous choisissons de laisser de côté la technique de calcul formel dans le but de construire le plus fidèlement possible les images de

propagation telles que nous les manipulons au quotidien⁸. Ces images sont issues du modèle physique, et résultent de sa compréhension profonde. Dans le cas de la conduction, c'est le principe de conservation qui nous permet d'expliquer que les potentielles contributions sont soit la température initiale, soit la température de bord, soit la température du fluide, soit la température radiative (aucune disparition).

A ce stade, nous choisissons de construire une classification des densités par type d'information transportée :

- La densité spatiale partant d'une impulsion de Dirac en (\vec{x}_I, t_I) transportant l'information de la condition initiale jusqu'en (\vec{x}, t) est :

$$\vec{x}_I \mapsto G_S(\vec{x}, t | \vec{x}_I, t_I)$$

- La densité de flux surfacique partant d'une impulsion de Dirac en (\vec{y}_D, t_D) transportant l'information de la condition de bord de type Dirichlet jusqu'en (\vec{x}, t) est :

$$(\vec{y}_D, t_D) \mapsto G_{\partial\Omega_D}(\vec{x}, t | \vec{y}_D, t_D)$$

- La densité de flux surfacique partant d'une impulsion de Dirac en (\vec{y}_F, t_F) transportant l'information de la condition de bord de type Robin jusqu'en (\vec{x}, t) est :

$$(\vec{y}_F, t_F) \mapsto G_{\partial\Omega_F}(\vec{x}, t | \vec{y}_F, t_F)$$

- La densité spatiale et temporelle partant d'une impulsion de Dirac en (\vec{x}_R, t_R) transportant l'information de la source radiative jusqu'en (\vec{x}, t) est :

$$(\vec{x}', t') \mapsto G_S(\vec{x}, t | \vec{x}_R, t_R)$$

Ainsi, connaissant la densité spatiale, surfacique et temporelle de ces différentes classes de densité et connaissant l'information qu'elles propagent, on écrit la température dans le solide au point $(\vec{x}, t) \in \bar{\Omega}_S \times [t_I, +\infty[$ comme la somme des contributions venant des conditions aux limites et des sources.

$$T_S(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} \int_{\Omega_S} G_S(\vec{x}, t | \vec{x}_I, t_I) T_I(\vec{x}_I) dx_I \\ + \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_D} G_{\partial\Omega_D}(\vec{x}, t | \vec{y}_D, t_D) T_D(\vec{y}_D, t_D) dy_D dt_D \\ + \sum_{i=1}^m \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F_i}^D} G_{\partial\Omega_{F_i}}(\vec{x}, t | \vec{y}_F, t_F) T_{F_i}(\vec{y}_F, t_F) dy_F dt_F \\ + \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F^\infty}^D} G_{\partial\Omega_{F^\infty}}(\vec{x}, t | \vec{y}_F, t_F) T_{F^\infty}(\vec{y}_F, t_F) dy_F dt_F \\ + \int_{t_I}^t \int_{\Omega_S} G_S(\vec{x}, t | \vec{x}_R, t_R) \frac{\zeta}{\rho C} T_R(\vec{x}_R, t_R) dx_R dt_R \end{array} \right) \quad (3.28)$$

8. c'est à dire utilisé à la fois très régulièrement et collectivement par notre communauté

où $G_{\partial\Omega_D} = G_{\partial\Omega_{F_i}} = G_{\partial\Omega_{F^\infty}} = -D\partial'_n G_S$, la dérivée partielle agissant sur le troisième variable i.e la position $\vec{\mathbf{y}}$ appartenant à une frontière. La justification formelle de cette équation est donnée dans [38, 40]. A partir de cette formulation et un travail de reformulation, on écrit la température, toujours sous une formulation intégrale,

$$T_S(\vec{\mathbf{x}}, t) = \left(\begin{array}{l} p_I^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) \int_{\Omega_S} p_{\vec{\mathbf{X}}_I^S}(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{x}}_I, t_I) dx_I [T_I(\vec{\mathbf{x}}_I)] \\ + p_D^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_D} p_{(\vec{\mathbf{Y}}_D^S, \mathcal{T}_D^S)}(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{y}}_D, t_D) dy_D dt_D [T_D(\vec{\mathbf{y}}_D, t_D)] \\ + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F_i}^D} p_{(\vec{\mathbf{Y}}_{F_i}^S, \mathcal{T}_{F_i}^S)}(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{y}}_F, t_F) dy_F dt_F [T_{F_i}(t_F)] \\ + p_{F^\infty}^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F^\infty}^D} p_{(\vec{\mathbf{Y}}_{F^\infty}^S, \mathcal{T}_{F^\infty}^S)}(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{y}}_F, t_F) dy_F dt_F [T_{F^\infty}(t_F)] \\ + p_R^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\Omega_S} p_{(\vec{\mathbf{X}}_R^S, \mathcal{T}_R^S)}(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{x}}_R, t_R) dx_R dt_R [T_R(\vec{\mathbf{x}}_R, t_R)] \end{array} \right) \quad (3.29)$$

puis comme une espérance,

$$T_S = \mathbb{E}_{\Theta_S}(\Theta_S) \quad (3.30)$$

avec

$$\Theta_S = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_I^S) T_I(\vec{\mathbf{X}}_I^S) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) \mathcal{B}(p_D^S) T_D(\vec{\mathbf{Y}}_D^S, \mathcal{T}_D^S) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \mathcal{B}(p_{F_1}^S) T_{F_1}(\mathcal{T}_{F_1}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_1}^S)) \mathcal{B}(p_{F_2}^S) T_{F_2}(\mathcal{T}_{F_2}) \\ + \dots \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \prod_{i=1}^{m-1} (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^S)) \mathcal{B}(p_{F_m}^S) T_{F_m}(\mathcal{T}_{F_m}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^S)) \mathcal{B}(p_{F^\infty}^S) T_{F^\infty}(\mathcal{T}_{F^\infty}^S) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^S)) (1 - \mathcal{B}(p_{F^\infty}^S)) T_R(\vec{\mathbf{X}}_R^S, \mathcal{T}_R^S) \end{array} \right) \quad (3.31)$$

où l'on définit les probabilités,

- p_I^S de transporter la température initiale T_I

$$p_I^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) = \int_{\Omega_S} G(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{x}}_I, t_I) dx_I \quad (3.32)$$

- p_D^S de transporter la température T_D

$$p_D^S(\vec{\mathbf{x}}, t|t_I) = \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_D} G_{\partial\Omega_D}(\vec{\mathbf{x}}, t|\vec{\mathbf{y}}_D, t_D) dy_D dt_D \quad (3.33)$$

- $p_{F_i}^S$ de transporter la température du fluide T_{F_i} de la ième cavité

$$p_{F_i}^S(\vec{x}, t|t_I) = \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F_i}^D} G_{\partial\Omega_{F_i}}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) dy_F dt_F \quad (3.34)$$

- $p_{F_\infty}^S$ de transporter la température du fluide T_{F_∞} de la cavité englobante

$$p_{F_\infty}^S(\vec{x}, t|t_I) = \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F_\infty}^D} G_{\partial\Omega_{F_\infty}}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) dy_F dt_F \quad (3.35)$$

- p_R^S de transporter la température radiative T_R

$$p_R^S(\vec{x}, t|t_I) = \int_{t_I}^t \int_{\Omega_S} G_S(\vec{x}, t|\vec{x}_R, t_R) \frac{\zeta}{\rho C} dx_R dt_R \quad (3.36)$$

les densités de probabilité associées à

- la condition initiale

$$p_{\vec{X}_I}^S(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I) = G_S(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I) / p_I^S(\vec{x}, t|t_I) \quad (3.37)$$

- la condition de bord de type Dirichlet

$$p_{(\vec{Y}_D^S, \mathcal{T}_D^S)}(\vec{x}, t|\vec{y}_D, t_D) = G_{\partial\Omega_D}(\vec{x}, t|\vec{y}_D, t_D) / p_D^S(\vec{x}, t|t_I) \quad (3.38)$$

- la condition de bord de type Robin de la ième cavité

$$p_{(\vec{Y}_{F_i}^S, \mathcal{T}_{F_i}^S)}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) = G_{\partial\Omega_{F_i}}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) / p_{F_i}^S(\vec{x}, t|t_I) \quad (3.39)$$

- la condition de bord de type Robin de la cavité englobante

$$p_{(\vec{Y}_{F_\infty}^S, \mathcal{T}_{F_\infty}^S)}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) = G_{\partial\Omega_{F_\infty}}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) / p_{F_\infty}^S(\vec{x}, t|t_I) \quad (3.40)$$

- et à la source radiative

$$p_{(\vec{X}_R^S, \mathcal{T}_R^S)}(\vec{x}, t|\vec{x}_R, t_R) = G_S(\vec{x}, t|\vec{x}_R, t_R) / p_R^S(\vec{x}, t|t_I) \quad (3.41)$$

et les variables aléatoires

- $\mathcal{B}(p)$ suit une loi de Bernoulli de paramètre p ,
- \vec{X}_I^S est la variable aléatoire de densité de probabilité $p_{\vec{X}_I^S}$,
- $(\vec{Y}_D^S, \mathcal{T}_D^S)$ est un couple de variables aléatoires de densité de probabilité $p_{(\vec{Y}_D^S, \mathcal{T}_D^S)}$,
- $(\vec{Y}_{F_i}^S, \mathcal{T}_{F_i}^S)$ est un couple de variables aléatoires de densité de probabilité $p_{(\vec{Y}_{F_i}^S, \mathcal{T}_{F_i}^S)}$,
- $(\vec{Y}_{F_\infty}^S, \mathcal{T}_{F_\infty}^S)$ est un couple de variables aléatoires de densité de probabilité $p_{(\vec{Y}_{F_\infty}^S, \mathcal{T}_{F_\infty}^S)}$,
- $(\vec{X}_R^S, \mathcal{T}_R^S)$ est un couple de variables aléatoires de densité de probabilité $p_{(\vec{X}_R^S, \mathcal{T}_R^S)}$,

La formulation intégrale (3.29) est définie à partir des probabilités : la probabilité p_I^S de propager la température initiale, la probabilité p_R^S de propager la température radiative, la probabilité p_D^S de propager la température imposée au bord, des probabilités $p_{F_i}^S$ de propager la température du fluide de la i ème cavité et la probabilité $p_{F_\infty}^S$ de propager la température du fluide de la cavité englobante.

Pour déterminer quelle contribution est transportée, est associée à chacune de ces probabilités une densité de répartition $p_{\vec{X}_I^S}$, $p_{(\vec{X}_R^S, \mathcal{T}_R^S)}$, $p_{(\vec{X}_D^S, \mathcal{T}_D^S)}$, $p_{(\vec{Y}_{F_i}^S, \mathcal{T}_{F_i}^S)}$ et $p_{(\vec{Y}_{F_\infty}^S, \mathcal{T}_{F_\infty}^S)}$.

L'algorithme d'échantillonnage de Θ_S est le suivant : on échantillonne le type de condition aux limites transporté suivant les probabilités p_I^S , p_R^S , p_D^S , $(p_{F_i}^S)_{i \in \{1, 2, \dots, m\}}$ et $p_{F_\infty}^S$, puis on échantillonne une position \vec{x}' et un temps t' suivant la densité de répartition, la contribution au poids de MC étant la température au point (\vec{x}', t') . Cet algorithme est décrit dans l'Algorithme 6.

Algorithme 6 : Fonction $F_{\Theta_S}(t)$ d'échantillonnage de Θ_S à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle même si il est connu ($w = T_I$ ou $w = T_D$), sinon son calcul est reporté dans la fonction $F_{\Theta_{F_i}}$ au temps t_F , $F_{\Theta_{F_\infty}}$ au point (\vec{y}_F, t_F) ou de F_{Θ_R} au point (\vec{x}_R, t_R) .

```

1 Échantillonner  $r$  suivant la loi uniforme sur  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
2 if  $r < p_I^S$  then
3   | Échantillonner  $\vec{x}_I^S$  suivant la loi uniforme sur  $\vec{X}_I^S$ ;
4   |  $w = T_I(\vec{X}_I)$ ;
5 else if  $r < p_I^S + p_D^S$  then
6   | Échantillonner  $(\vec{y}_D, t_D)$  suivant  $(\vec{Y}_D^S, \mathcal{T}_D^S)$ ;
7   |  $w = T_D(\vec{y}_D, t_D)$ ;
8 else if  $r < p_I^S + p_D^S + p_{F_1}^S$  then
9   | Échantillonner  $(\vec{y}_F, t_F)$  suivant  $(\vec{Y}_{F_1}^S, \mathcal{T}_{F_1}^S)$ ;
10  |  $w = F_{\Theta_{F_1}}(t_F)$ ;
11 else if  $r < p_I^S + p_D^S + p_{F_1}^S + p_{F_2}^S$  then
12  | Échantillonner  $(\vec{y}_F, t_F)$  suivant  $(\vec{Y}_{F_2}^S, \mathcal{T}_{F_2}^S)$ ;
13  |  $w = F_{\Theta_{F_2}}(t_F)$ ;
14 else if  $r < p_I^S + p_D^S + p_{F_1}^S + p_{F_2}^S + p_{F_3}^S$  then
15  | ...
16 else if  $r < p_I^S + p_D^S + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^S$  then
17  | Échantillonner  $(\vec{y}_F, t_F)$  suivant  $(\vec{Y}_{F_m}^S, \mathcal{T}_{F_m}^S)$ ;
18  |  $w = F_{\Theta_{F_m}}(t_F)$ ;
19 else if  $r < p_I^S + p_D^S + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^S + p_{F_\infty}^S$  then
20  | Échantillonner  $(\vec{y}_F, t_F)$  suivant  $(\vec{Y}_{F_\infty}^S, \mathcal{T}_{F_\infty}^S)$ ;
21  |  $w = F_{\Theta_{F_\infty}}(\vec{y}_F, t_F)$ ;
22 else
23  | Échantillonner  $(\vec{x}_R, t_R)$  suivant  $(\vec{X}_R^S, \mathcal{T}_R^S)$ ;
24  |  $w = F_{\Theta_R}(\vec{x}_R, t_R)$ ;

```

Nous schématiserons les différentes réalisations de Θ_S comme illustré dans la Figure 3.7.

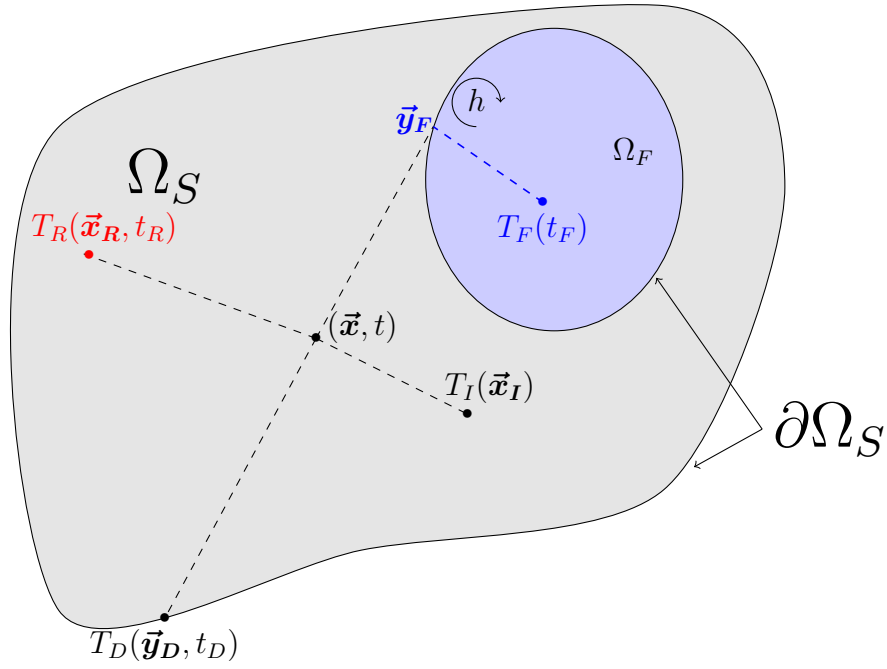


FIGURE 3.7 – Illustration de quatre réalisations selon Θ_S (d'origine le point (\vec{x}, t)) associées au transfert par conduction, représentant les quatre contributions pouvant être retournées : la condition initiale T_I au point \vec{x}_I , la température radiative T_R au point (\vec{x}_R, t_R) , la température du fluide T_F au temps t_F et la température imposée à la frontière T_D au point (\vec{y}_D, t_D) . Nous représentons ici une seule cavité fluide.

3.2.2.3 Techniques d'échantillonnage des contributions conductives

Contrairement à ce que nous avons vu pour le transfert convectif, la fonction de Green G_S associée au transfert conductif est indissociable de la géométrie et des conditions de bord. Pour mieux comprendre cette dépendance, nous considérons un exemple le plus simple possible, celui du milieu semi-infini, en dimension 1 avec une des trois conditions de bord Dirichlet, Robin et Neumann. Dans ce cas particulier, les fonctions de Green sont connues analytiquement (voir Figure 3.8).

Ces fonctions de Green peuvent être obtenues via la méthode des images [44] selon le raisonnement suivant :

- Pour la condition de Dirichlet, l'information est "tuée" à la frontière (la densité est nulle à la frontière $G = 0$) : on raisonne comme si la propagation avait lieu en milieu infini, puis on retranche à la densité à l'intérieur du domaine solide la densité à l'extérieur du domaine par symétrie.
- Pour la condition de Neumann, l'information est réfléchié spéculairement à la frontière (le flux associé à G est nul à la frontière $-D\vec{\nabla}G = 0$) : on raisonne comme si la propagation avait lieu en milieu infini, puis on ajoute à la densité à l'intérieur du domaine solide la densité à l'extérieur du domaine.

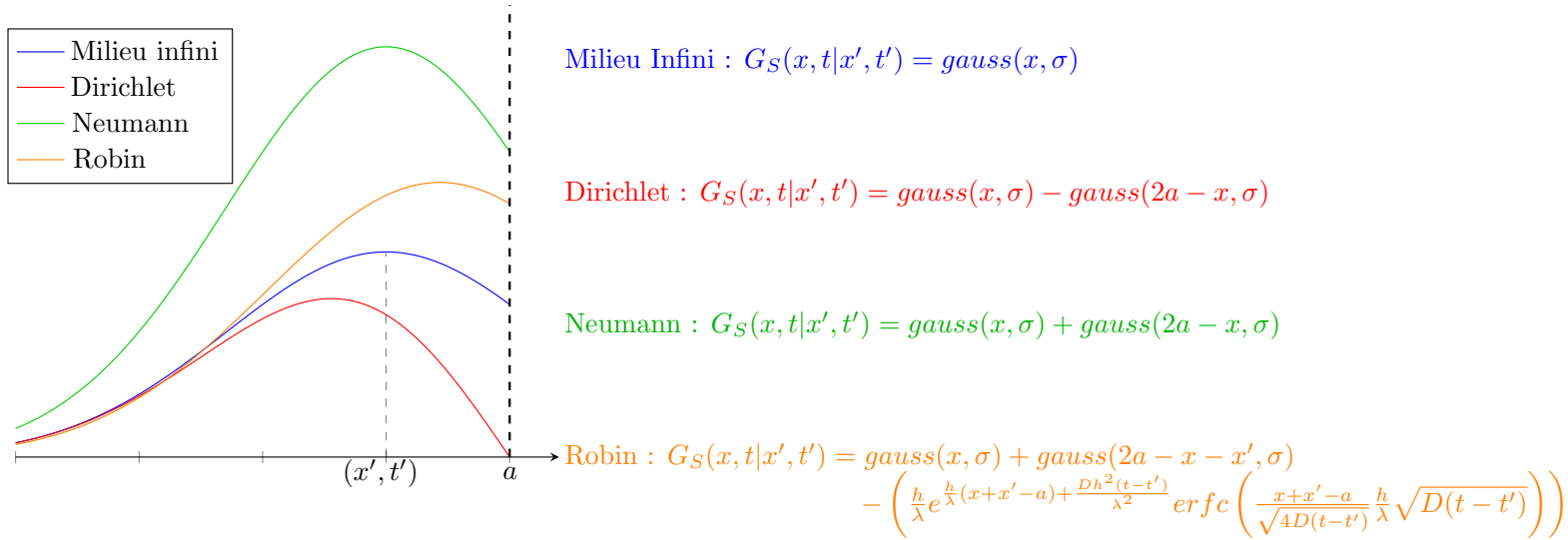


FIGURE 3.8 – Illustration de la densité de présence (non normalisée) d'un processus diffusif dans un milieu semi-infini. On note la gaussienne $\text{gauss}(x, \sigma) : x' \mapsto \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma^2}\right)$ centré en x d'écart type $\sigma = \sqrt{2D(t-t')}$. La frontière est considérée en $x = a$ et on note h_F le coefficient d'échange convectif.

— Pour la condition de Robin, c'est un peu plus compliqué, voir [44].

Malgré cette dépendance à la géométrie, la littérature propose une multitude d'autres géométries où la FG avec condition de Dirichlet sur la frontière est connue, comme par exemple dans le segment [39, 46, 48], dans une sphère [49] ou encore dans un parallélépipède [63, 51, 52, 53, 54] dont une construction est proposée dans l'Annexe B.

L'approche la plus "populaire" concernant l'échantillonnage des contributions selon la fonction de Green conductive, dans un domaine Ω fermé borné avec condition de Dirichlet, reste la proposition de Walk-on-Sphere [49] qui consiste à se déplacer à l'aide de sphères de tailles maximales avec pour centre le point sonde : connaissant la fonction de Green de la sphère, on peut en déduire

1. une distribution des temps de sortie,
2. une distribution des positions de sortie sur la sphère (qui suit une loi uniforme si la conductivité λ est uniforme !),
3. une distribution des positions à l'intérieur de la sphère sachant que l'information est restée confinée à l'intérieur durant le temps qui le sépare de la condition initiale.

La stratégie proposée consiste à générer la sphère dont le centre est le point sonde, de rayon maximal contenu dans Ω puis à épaissir la frontière suivant un paramètre ϵ dans le but de produire une issue (le contact entre la sphère et Ω se résume la plus part du temps à un point !). Ensuite, selon ces trois distributions, il devient possible d'échantillonner une contribution associée à la sphère. Dans ce cas, trois situations sont envisageables :

- soit on atteint la condition initiale à l'intérieur de la sphère et on récupère comme poids de MC la température initiale au point correspondant,
- soit on atteint un point de la frontière de la sphère qui est située à une distance inférieure à ϵ de la frontière $\partial\Omega$ et on récupère comme poids de MC la température de bord

imposée,

- soit on atteint un point de la frontière de la sphère située à une distance supérieure à ϵ de la frontière $\partial\Omega$ (à un temps qui s'est inévitablement rapproché de la condition initiale) et dans ce cas on recommence de façon récursive.

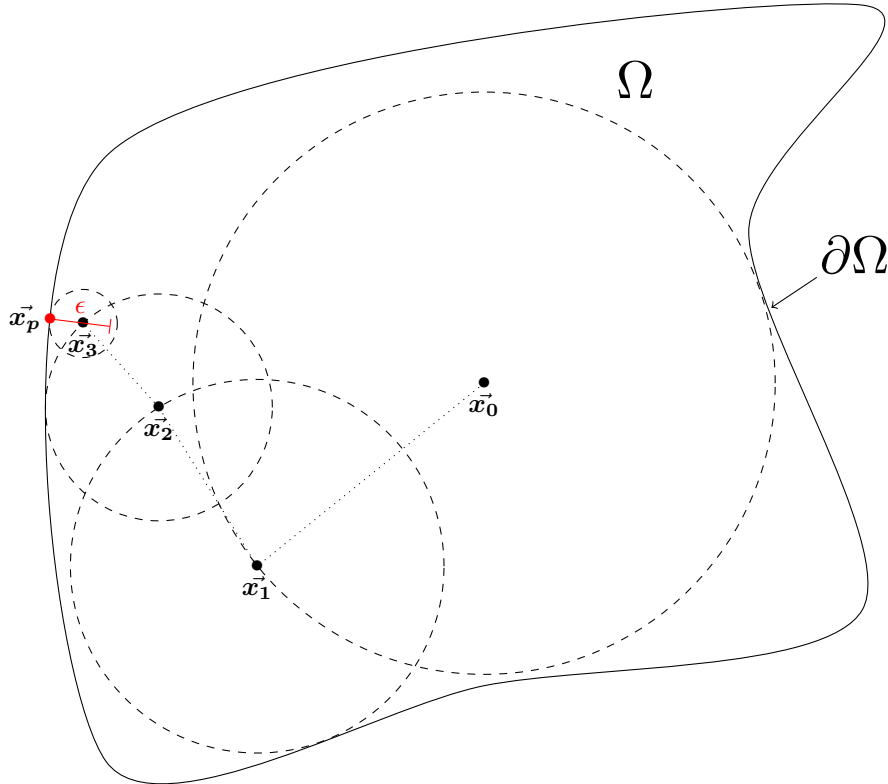


FIGURE 3.9 – Walk-on-Sphere

On voit ainsi émerger une "marche" sur des sphères jusqu'à atteindre une condition aux limites. Malheureusement, l'inconvénient de cette stratégie est double. Premièrement, l'épaississement de la frontière, réalisé à partir du paramètre ϵ est source d'approximation. Cette approximation n'est pas vraiment gênante car le nombre de sauts moyen pour atteindre la frontière croît en $|\log(\epsilon)|$, il est donc possible d'envisager un paramètre ϵ très petit. Deuxièmement, la mise en œuvre nécessite, à chaque saut, la résolution d'un problème d'optimisation : déterminer la sphère de rayon maximal avec pour centre le point sonde, contenue dans Ω . Ce problème d'optimisation est extrêmement lourd en temps de calcul lors de la prise en compte d'une géométrie complexe ! Notre incapacité à générer une telle sphère avec efficacité conduit à une impraticabilité de cette stratégie en géométrie complexe !

Mais les recherches portant sur cette question (échantillonnage des contributions) sont actuellement très actives et les algorithmes deviennent de plus en plus performants informatiquement, comme le démontrent les récents travaux [52, 53, 54, 55] proposant un outil efficace pour échantillonner les contributions dans un domaine polyèdre quelconque avec une condition de Dirichlet à la frontière (la stratégie est similaire à celle de Walk-on-Sphere mais

avec des rectangles) : Cette proposition consiste à calculer la fonction de Green dans un rectangle de dimension arbitraire, pour en déduire

1. une distribution des temps de sortie (qui dépend de la position du point sonde),
2. une distribution des positions de sortie (qui dépend de la position du point sonde et du temps de sortie),
3. une distribution des positions à l'intérieur du rectangle sachant que l'information est restée confinée à l'intérieur du rectangle durant le temps qui le sépare de la condition initiale (qui dépend de la position du point sonde et du temps d'observation)

La proposition consiste alors à générer de façon astucieuse⁹ un rectangle contenant le point sonde et contenu dans le polyèdre, tout en maximisant la surface de contact entre le rectangle et la frontière du polyèdre. Ensuite, via les trois distributions, il devient possible d'échantillonner une contribution associée au rectangle. Dans ce cas, trois situations sont envisageables :

- soit on atteint la condition initiale à l'intérieur du rectangle et on récupère comme poids de MC la température initiale au point correspondant,
- soit on atteint un point de la frontière du rectangle qui coïncide avec la frontière du polyèdre et on récupère comme poids de MC la température de bord imposée,
- soit on atteint un point de la frontière du rectangle situé à nouveau à l'intérieur du polyèdre (à un temps qui s'est inévitablement rapproché de la condition initiale) et dans ce cas on recommence de façon récursive.

On voit ainsi émerger une "marche" sur des pavés jusqu'à atteindre une condition aux limites ! Contrairement à la marche Walk-on-Sphere, il n'y a aucun paramètre d'épaississement, faisant de cette approche une méthode de référence, les différentes contributions étant échantillonnées de façon exacte ! La question qu'il reste à éclaircir est notre capacité à générer un tel pavé dans une géométrie complexe. Néanmoins, et même si nous étions en capacité de produire de tels pavés, la prise en compte du couplage et de paramètres hétérogènes nécessite un travail supplémentaire conséquent.

Des travaux ont abordé la question, notamment en s'intéressant à l'échantillonnage des contributions dans un domaine où la conductivité ne serait pas uniforme, par exemple dans le cas d'une discontinuité à une interface [50, 56, 57, 58], ou encore avec des conditions de bords de type Robin ou Neumann [64, 65, 66].

En pratique, l'échantillonnage des contributions suivant la fonction de Green G_S reste soit très lourd soit impraticable en géométrie complexe ! Nous verrons dans la section 3.3 comment contourner cette impasse.

9. c'est à dire en utilisant un procédé à la fois pratique et ingénieux

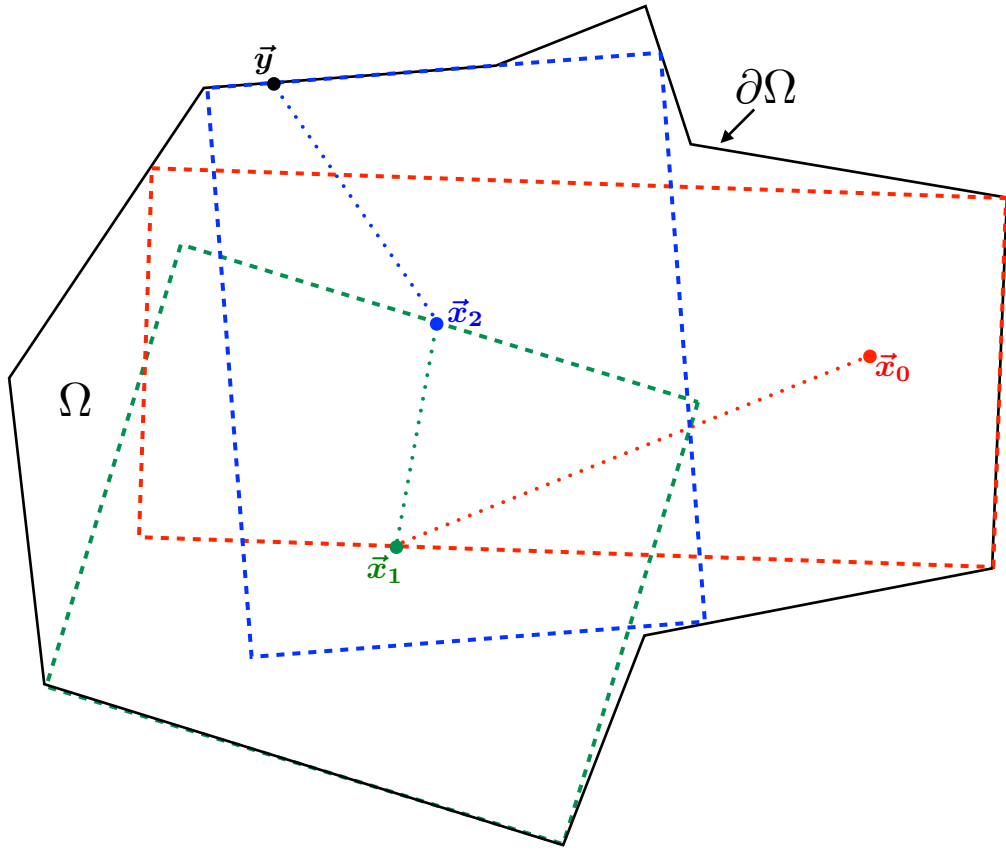


FIGURE 3.10 – Walk-on-parallélepède-rectangle

3.2.2.4 Fonction de Green pour le Rayonnement

La température radiative linéarisée T_R est exprimée comme la température moyenne sur l'ensemble des directions de $T_{R_{\vec{u}}}$, elle s'écrit naturellement comme une espérance.

$$T_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du T_{R_{\vec{u}}}(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_{\vec{U}} \left(T_{R_{\vec{U}}}(\vec{x}, t) \right) \quad (3.42)$$

où \vec{U} suit une loi uniforme sur la sphère. Il ne nous reste donc plus qu'à définir le propagateur associé à la température de radiance $T_{R_{\vec{u}}}$ (qui est solution d'une équation de transport linéaire). En appliquant la méthode des fonctions de Green, on définit le propagateur $G_R(\vec{x}, \vec{u} | \vec{x}', \vec{u}')$ comme la solution de l'équation (3.43).

$$\begin{cases} \vec{u} \cdot \vec{\nabla} G_R = -k_e G_R + \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta(\vec{u} - \vec{u}'), & \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega}, \vec{u} \in \mathbb{S}^2, t \in]t_I, +\infty[\\ G_R = 0, & \vec{y} \in \partial\Omega_R, \vec{u} \in \mathbb{S}^2, t \in]t_I, +\infty[\end{cases} \quad (3.43)$$

Cette équation étant une simple équation de transport, on en déduit l'expression de G_R ,

$$G_R(\vec{x}, \vec{u}|\vec{x}', \vec{u}') = \delta(\vec{u} - \vec{u}')\delta_3\left(\frac{\vec{x} - \vec{x}'}{\|\vec{x} - \vec{x}'\|} + \vec{u}\right) e^{-k_e\|\vec{x} - \vec{x}'\|} \quad (3.44)$$

où δ_3 doit être compris comme un Dirac "linéique" en dimension trois. En choisissant k_e uniforme et en appliquant la méthode des fonctions de Green, on obtient,

$$T_{R_{\vec{u}}}(\vec{x}, t) = \left(\begin{aligned} & \int_{\Omega} dx' \int_{\mathbb{S}^2} du' G_R(\vec{x}, \vec{u}|\vec{x}', \vec{u}') \left(k_a T(\vec{x}', t) + k_s \int_{\mathbb{S}^2} p_S(-\vec{u}' | -\vec{u}) T_{R, \vec{u}'}(\vec{x}', t) \right) \\ & + \int_{\partial\Omega_R} dy \int_{\mathbb{S}_+^2} du' G_R(\vec{x}, \vec{u}|\vec{x}', \vec{u}') T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{x}', t) \end{aligned} \right) \quad (3.45)$$

puis en remplaçant G_R par son expression,

$$T_{R_{\vec{u}}}(\vec{x}, t) = \left(e^{-k_e l_{\partial\Omega_R}} T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{x} - l_{\partial\Omega_R} \vec{u}, t) + \int_0^{l_{\partial\Omega_R}} k_e e^{-k_e l} dl \left(\frac{k_a}{k_e} T + \frac{k_s}{k_e} \int_{\mathbb{S}^2} p_S(\vec{u}|\vec{u}') du' T_{R, \vec{u}'} \right) \right)_{|(\vec{x} - l\vec{u}, t)} \quad (3.46)$$

Finalement, en combinant les équations (3.42) et (3.46), on écrit,

$$\left\{ \begin{aligned} T_R(\vec{x}, t) &= \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du T_{R_{\vec{u}}}(\vec{x}, t) \\ T_{R_{\vec{u}}}(\vec{x}, t) &= \left(e^{-k_e l_{\partial\Omega_R}} T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{x} - l_{\partial\Omega_R} \vec{u}, t) + \int_0^{l_{\partial\Omega_R}} k_e e^{-k_e l} dl \left(\frac{k_a}{k_e} T + \frac{k_s}{k_e} \int_{\mathbb{S}^2} p_S(\vec{u}|\vec{u}') du' T_{R, \vec{u}'} \right) \right)_{|(\vec{x} - l\vec{u}, t)} \end{aligned} \right. \quad (3.47)$$

où $l_{\partial\Omega_R} \equiv l_{\partial\Omega_R}(\vec{x}, \vec{u})$ est la distance du point \vec{x} à la frontière $\partial\Omega_R$ dans la direction $-\vec{u}$ et p_S la fonction de phase.

A ce stade, la température $T_{R_{\vec{u}}}$ est exprimée comme la solution d'une équation de Fredholm. Une façon d'obtenir son expression consiste à employer la méthode du noyau itéré [67, 68], que nous ne développerons pas ici, le travail de formulation explicite étant difficile et trop laborieux dans ce cadre. Une fois cette expression établie, en remplaçant $T_{R_{\vec{u}}}$ par son expression dans (3.42), on obtient l'équation suivante,

$$T_R(\vec{x}, t) = \left(\begin{aligned} & p_S^R(\vec{x}, t) \int_{\Omega_S} p_{X_S^R}(\vec{x}, t|\vec{x}_S, t) dx_S T_S(\vec{x}_S, t) \\ & + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^R(\vec{x}, t) T_{F_i}(t) \\ & + p_{F^\infty}^R(\vec{x}, t) T_{F^\infty}(t) \\ & + p_{R, \partial\Omega_R}^R(\vec{x}, t) \int_{\partial\Omega_R} p_{Y_{R, \partial\Omega_R}}^R(\vec{x}, t|\vec{y}_R, t) dy_R T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{y}_R, t) \end{aligned} \right) \quad (3.48)$$

que l'on réécrit comme une espérance,

$$T_R = \mathbb{E}_{\Theta_R}(\Theta_R) \quad (3.49)$$

où

$$\Theta_R = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_S^R) T_S(\vec{X}_S, t) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \mathcal{B}(p_{F_1}^R) T_{F_1}(t) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_1}^R)) \mathcal{B}(p_{F_2}^R) T_{F_2}(t) \\ + \dots \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \prod_{i=1}^{m-1} (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^R)) \mathcal{B}(p_{F_m}^R) T_{F_m}(t) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^R)) \mathcal{B}(p_{F_\infty}^R) T_{F_\infty}(t) \\ (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^R)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_\infty}^R)) T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{Y}_{R, \partial\Omega_R}^R, t) \end{array} \right) \quad (3.50)$$

où l'on note

- p_S^R la probabilité de propager l'information de la température d'un point du solide échantillonné suivant la densité de probabilités $p_{X_S^R}$,
- $p_{F_i}^R$ la probabilité de transporter la température de la i ème cavité fluide $T_{F_i}^R$,
- $p_{F_\infty}^R$ la probabilité de transporter la température de la cavité englobante $T_{F_\infty}^R$,
- et $p_{R, \partial\Omega_R}^R$ la probabilité de transporter la température d'un point du bord échantillonné suivant la densité de probabilités $p_{Y_{R, \partial\Omega_R}^R}$.

Les probabilités p_S^R , $p_{F_i}^R$, $p_{F_\infty}^R$ et $p_{R, \partial\Omega_R}^R$ ne sont rien d'autre que les facteurs de forme ponctuel, du point (\vec{x}, t) vers le solide Ω_S , les cavités Ω_{F_i} , la cavité englobante Ω_{F_∞} et la surface $\partial\Omega_R$ respectivement. L'algorithme d'échantillonnage de Θ_R est décrit dans l'Algorithme 7.

Algorithme 7 : Fonction $F_{\Theta_R}(\vec{\mathbf{x}}, t)$ d'échantillonnage de Θ_R à la position $\vec{\mathbf{x}}$ au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle même si il est connu ($w = T_{R, \partial\Omega_R}(t)$ ou $w = T_{F^\infty}(t)$), sinon son calcul est reporté dans la fonction F_{Θ_S} au temps $(\vec{\mathbf{x}}_S, t)$, $F_{\Theta_{F_i}}$ au temps t .

```

1 Échantillonner  $r$  suivant la loi uniforme sur  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
2 if  $r < p_S^R$  then
3   | Échantillonner  $\vec{\mathbf{x}}_S$  suivant la loi uniforme sur  $X_S^R$ ;
4   |  $w = F_{\Theta_S}(\vec{\mathbf{x}}_S, t)$ ;
5 else if  $r < p_S^R + p_{F_1}^R$  then
6   |  $w = F_{\Theta_{F_1}}(t)$ ;
7 else if  $r < p_S^R + p_{F_1}^R + p_{F_2}^R$  then
8   |  $w = F_{\Theta_{F_2}}(t)$ ;
9 else if  $r < p_S^R + p_{F_1}^R + p_{F_2}^R + p_{F_3}^R$  then
10  | ...;
11 else if  $r < p_S^R + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^R$  then
12  |  $w = F_{\Theta_{F_m}}(t)$ ;
13 else if  $r < p_S^R + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^R + p_{F^\infty}^R$  then
14  |  $w = T_{F^\infty}(t)$ ;
15 else
16  | Échantillonner  $(\vec{\mathbf{y}}_R)$  suivant  $Y_{R, \partial\Omega_R}^R$ ;
17  |  $w = T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{\mathbf{y}}_R, t)$ ;

```

Nous schématiserons les différentes réalisations de Θ_R comme illustré dans la Figure 3.11.

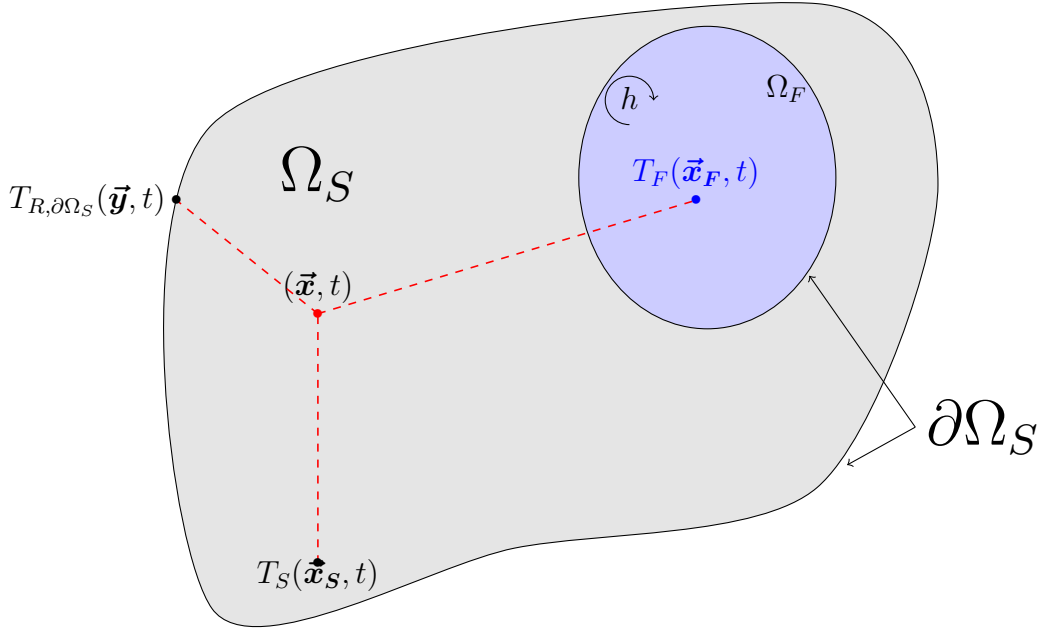


FIGURE 3.11 – Représentation de trois réalisations de Θ_R : la température radiative imposée aux conditions à la limite $T_{R,\partial\Omega_D}$ au point \mathbf{y} , la température du solide T_S au point \mathbf{x}_S et la température du fluide T_F . Nous ne considérons ici, pour simplifier, qu'une seule cavité fluide.

3.2.2.5 Techniques d'échantillonnage des contributions radiatives

Comme pour la conduction, on constate que les probabilités et densités de probabilité nécessaires à l'élaboration de l'équation (3.48) sont accessibles seulement dans des configurations académiques là où la température radiative est connue analytiquement ! Pour cette raison, la stratégie généralement adoptée revient à reformuler l'équation de Fredholm (3.47) en la formulation intégrale suivante (où pour simplifier l'écriture, on considère un coefficient d'extinction k_e uniforme, dans le cas contraire, la reformulation nécessite la technique des ACN voir 4.1.1),

$$\begin{cases} T_R(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du T_{R_{\mathbf{u}}}(\mathbf{x}, t) \\ T_{R_{\mathbf{u}}}(\mathbf{x}, t) = \int_0^{+\infty} k_e e^{-k_e l} dl \left(\begin{aligned} &\mathcal{H}(l < l_{\partial\Omega_R}) \left(\frac{k_a}{k_e} T + \frac{k_s}{k_e} \int_{\mathbb{S}^2} p_S(\mathbf{u}|\mathbf{u}') du' T_{R,\mathbf{u}'} \right)_{|(\mathbf{x}-l\mathbf{u},t)} \\ &+ \mathcal{H}(l > l_{\partial\Omega_R}) T_{R,\partial\Omega_R}(\mathbf{x} - l_{\partial\Omega_R} \mathbf{u}, t) \end{aligned} \right) \end{cases} \quad (3.51)$$

où $l_{\partial\Omega_R} \equiv l_{\partial\Omega_R}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ est la distance du point \mathbf{x} à la frontière $\partial\Omega_R$ dans la direction $-\mathbf{u}$. L'algorithme associé à (3.51) consiste à échantillonner une direction uniformément sur la sphère, générer une longueur l suivant une loi exponentielle de paramètre k_e . Ensuite deux situations sont envisageables,

— soit $l < l_{\partial\Omega_R}$ et dans ce cas on récupère la température T comme poids de MC avec

la probabilité k_a/k_e (probabilité d'être absorbé par le milieu), et la température de radiance $T_{R,\vec{u}'}$ dans la direction \vec{u}' échantillonnée suivant la fonction de phase p_S comme poids de MC avec la probabilité k_s/k_e (probabilité d'être diffusé),

- soit $l > l_{\partial\Omega_R}$ et dans ce cas on récupère la température imposée à la frontière $T_{R,\partial\Omega_R}$ comme poids de MC.

Une description et une mise en œuvre du MC sont proposées dans [14, 69]. Nous continuerons de noter Θ_R la variable aléatoire issue de l'équation (3.51). Une illustration d'un tel échantillonnage est proposée dans la Figure 3.12.

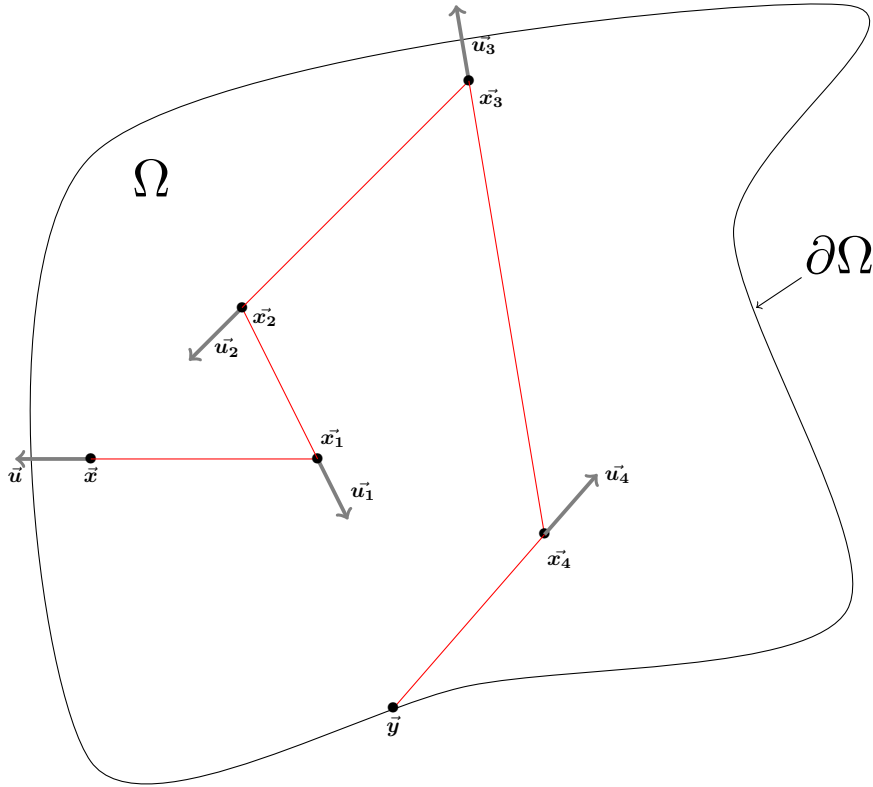


FIGURE 3.12 – Représentation de l'échantillonnage d'une contribution selon (3.51), dans un domaine purement diffusant où est imposée la température radiative incidente à la frontière du domaine $T_{R,\partial\Omega}$, partant de la position \vec{x} dans la direction $-\vec{u}$ diffusant dans le milieu jusqu'à atteindre la frontière en \vec{y} , le problème étant stationnaire. Lors de cet échantillonnage, nous avons tiré cinq longueurs suivant la loi de Beer puis quatre directions suivant la fonction de phase jusqu'à atteindre la frontière.

Même si le système d'équations intégrales (3.51) n'est pas similaire à l'équation (3.11), le MC reste extrêmement efficace car il hérite (au même sens que la luminance) des outils de la communauté de la synthèse d'image, le rendant insensible au niveau de raffinement de la géométrie : les contributions sont échantillonnées grâce à un intersecteur rayon-triangle extrêmement performant dès lors que la géométrie est décrite par un objet CAO. De plus, la technique des algorithmes à collisions nulles permet de considérer des paramètres optiques hétérogènes. La température radiative peut ainsi être estimée par MC de façon exacte dans

des configurations d'une grande complexité, sans aucune dégradation du modèle physique et de la géométrie.

3.2.3 Méthode de Green et Couplages

A ce stade, la méthode de Green nous a permis d'écrire (même si nous n'avons pas forcément accès aux probabilités et densités de probabilité) la température de chaque cavité fluide T_{F_i} , la température dans le solide T_S et la température radiative T_R comme des espérances. Dans ces trois cas, les poids de MC (les contributions) sont soit la température initiale (connue), soit une température imposée à la frontière (connue), soit l'une de ces trois mêmes températures (inconnues). Lorsque la température est inconnue, nous proposons de la remplacer par l'échantillonnage de sa v.a. selon le principe de double randomisation¹⁰. Ce nouvel échantillonnage conduit nécessairement à une autre température connue ou inconnue. On procède alors de manière récursive jusqu'à atteindre une température connue.

Selon cette démarche, la température T solution de l'équation (3.7) est exprimée comme une succession infinie d'intégrales emboîtées,

10. les transferts thermiques considérés étant linéaires, chaque température est exprimée comme une combinaison linéaire des autres températures

$$T(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} p_I^S(\vec{x}, t|t_I) \int_{\Omega_S} p_{\vec{X}_I^S}(\vec{x}, t|\vec{x}_I, t_I) dx_I [T_I(\vec{x}_I)] \\ + p_D^S(\vec{x}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_D} p_{(\vec{Y}_D^S, \mathcal{T}_D^S)}(\vec{x}, t|\vec{y}_D, t_D) dy_D dt_D [T_D(\vec{y}_D, t_D)] \\ + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^S(\vec{x}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F_i}^D} p_{(\vec{Y}_{F_i}^S, \mathcal{T}_{F_i}^S)}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) dy_F dt_F [T_{F_i}(t_F)] \\ + p_{F^\infty}^S(\vec{x}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\partial\Omega_{F^\infty}^D} p_{(\vec{Y}_{F^\infty}^S, \mathcal{T}_{F^\infty}^S)}(\vec{x}, t|\vec{y}_F, t_F) dy_F dt_F [T_{F^\infty}(t_F)] \\ + p_R^S(\vec{x}, t|t_I) \int_{t_I}^t \int_{\Omega_S} p_{(\vec{X}_R^S, \mathcal{T}_R^S)}(\vec{x}, t|\vec{x}_R, t_R) dx_R dt_R [T_R(\vec{x}_R, t_R)] \end{array} \right), \quad \begin{cases} \vec{x} \in \bar{\Omega}_S \\ t \in [t_I, +\infty[\end{cases}$$

(3.29)

$$T(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} p_I^{F_i}(t|t_I) T_I \\ + p_R^{F_i}(t|t_I) \int_{\Omega_F} \int_{t_I}^t p_{(\vec{X}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i})}(t|\vec{x}_R, t_R) d\vec{x}_R dt_R T_R(\vec{x}_R, t_R) \\ + p_S^{F_i}(t|t_I) \int_{\partial\Omega_F} \int_{t_I}^t p_{(\vec{Y}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i})}(t|\vec{y}_S, t_S) d\vec{y}_S dt_S T_S(\vec{y}_S, t_S) \end{array} \right), \quad \begin{cases} \vec{x} \in \mathring{\Omega}_{F_i} \\ t \in [t_I, +\infty[\end{cases}$$

(3.24)

$$T_R(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} p_S^R(\vec{x}, t) \int_{\Omega_S} p_{X_S^R}(\vec{x}, t|\vec{x}_S, t) dx_S T_S(\vec{x}_S, t) \\ + \sum_{i=1}^m p_{F_i}^R(\vec{x}, t) T_{F_i}(t) \\ + p_{F^\infty}^R(\vec{x}, t) T_{F^\infty}(t) \\ + p_{R, \partial\Omega_R}^R(\vec{x}, t) \int_{\partial\Omega_R} p_{Y_{R, \partial\Omega_R}^R}(\vec{x}, t|\vec{y}_R, t) dy_R T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{y}_R, t) \end{array} \right), \quad \begin{cases} \vec{x} \in \Omega \\ t \in [t_I, +\infty[\end{cases}$$

(3.48)

que l'on écrit comme une espérance

$$T = \mathbb{E}_\Theta(\Theta) \tag{3.53}$$

où

$$\Theta(\vec{\mathbf{x}}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_I^S) T_I(\vec{\mathbf{X}}_I^S) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) \mathcal{B}(p_D^S) T_D(\vec{\mathbf{Y}}_D^S, \mathcal{T}_D^S) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \mathcal{B}(p_{F_1}^S) \Theta(\vec{\mathbf{x}}_{F_1}, \mathcal{T}_{F_1}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_1}^S)) \mathcal{B}(p_{F_2}^S) \Theta(\vec{\mathbf{x}}_{F_2}, \mathcal{T}_{F_2}) \\ + \dots \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \prod_{i=1}^{m-1} (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^S)) \mathcal{B}(p_{F_m}^S) \Theta(\vec{\mathbf{x}}_{F_m}, \mathcal{T}_{F_m}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^S)) \mathcal{B}(p_{F_\infty}^S) T_{F_\infty}(\mathcal{T}_{F_\infty}^S) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^S)) (1 - \mathcal{B}(p_D^S)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^S)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_\infty}^S)) \Theta_R(\vec{\mathbf{X}}_R^S, \mathcal{T}_R^S) \end{array} \right), \quad \begin{cases} \vec{\mathbf{x}} \in \bar{\Omega}_S \\ t \in [t_I, +\infty[\end{cases} \quad (3.31)$$

$$\Theta(\vec{\mathbf{x}}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_I^{F_i}) T_I \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^{F_i})) \mathcal{B}(p_R^{F_i}) \Theta_R(\vec{\mathbf{X}}_R^{F_i}, \mathcal{T}_R^{F_i}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_I^{F_i})) (1 - \mathcal{B}(p_R^{F_i})) \Theta(\vec{\mathbf{Y}}_S^{F_i}, \mathcal{T}_S^{F_i}) \end{array} \right), \quad \begin{cases} \vec{\mathbf{x}} \in \overset{\circ}{\Omega}_F \\ t \in [t_I, +\infty[\end{cases} \quad (3.26)$$

$$\Theta_R(\vec{\mathbf{x}}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_S^R) \Theta(\vec{\mathbf{X}}_S, t) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \mathcal{B}(p_{F_1}^R) \Theta(\vec{\mathbf{x}}_{F_1}, t) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_1}^R)) \mathcal{B}(p_{F_2}^R) \Theta(\vec{\mathbf{x}}_{F_2}, t) \\ + \dots \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \prod_{i=1}^{m-1} (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^R)) \mathcal{B}(p_{F_m}^R) \Theta(\vec{\mathbf{x}}_{F_m}, t) \\ + (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^R)) \mathcal{B}(p_{F_\infty}^R) T_{F_\infty}(t) \\ (1 - \mathcal{B}(p_S^R)) \prod_{i=1}^m (1 - \mathcal{B}(p_{F_i}^R)) (1 - \mathcal{B}(p_{F_\infty}^R)) T_{R, \partial\Omega_R}(\vec{\mathbf{Y}}_{R, \partial\Omega_R}^R, t) \end{array} \right), \quad \begin{cases} \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \\ t \in [t_I, +\infty[\end{cases} \quad (3.50)$$

où $\forall i \in \{1, 2, \dots, m\}$, $\vec{\mathbf{x}}_{F_i} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F_i}$, l'adhérence du domaine solide est noté $\bar{\Omega}_S = \Omega_S \cup \partial\Omega_S$ et l'intérieur du domaine fluide est noté $\overset{\circ}{\Omega}_F = \Omega_F \setminus \partial\Omega_F$. L'algorithme d'échantillonnage de Θ est décrit dans l'Algorithme 8.

Algorithme 8 : Fonction $F_{\Theta}(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage de Θ à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est reporté dans l'une des fonctions F_{Θ_S} ou F_{Θ_F} au point (\vec{x}, t) .

```

1 Échantillonner  $r$  suivant la loi uniforme sur  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
2 if  $\vec{x} \in \bar{\Omega}_S$  then
3   |  $w = F_{\Theta_S}(\vec{x}, t)$ ;
4 else if  $\vec{x} \in \bar{\Omega}_{F_i}$  then
5   |  $w = F_{\Theta_{F_i}}(\vec{x}, t)$ ;

```

Au lieu d'évaluer analytiquement ou numériquement la valeur de la formulation intégrale (3.52), ce qui peut être extrêmement difficile en toute généralité, l'idée est de la reconstruire statistiquement par Monte-Carlo via un grand nombre d'échantillonnages de Θ . Une réalisation de Θ est pensée comme une combinaison de trois réalisations selon Θ_S , Θ_{F_i} et Θ_R , et consiste schématiquement à lier bout à bout chacune d'entre elles.

Prenons l'exemple de l'évaluation de la température du solide à une position et un temps donné : dans le solide on commence par échantillonner une contribution selon le transfert conductif qui peut être soit la condition initiale (connue), soit une condition de Dirichlet (connue), soit la température radiative (inconnue), soit la température du fluide de l'une des cavités (inconnue). Si la contribution est inconnue, alors on la remplace par un échantillonnage de la variable aléatoire associée au transfert correspondant et ainsi de suite. Une illustration de cette combinaison est proposée dans la figure 3.13.

L'échantillonnage de Θ nécessite la connaissance des fonctions de Green liées aux transferts convectif G_{F_i} , conductif G_S et radiatif G_R . Lorsqu'elles sont connues, l'Algorithme 8 est extrêmement efficace car très rapide (en temps de calcul), facile à implémenter et exact ! Malheureusement, comme nous venons de le montrer, son évaluation, triviale pour la convection, astucieuse pour le rayonnement, est soit très lourde soit impraticable pour la conduction selon la géométrie considérée : les différentes probabilités et densités de probabilités du transfert conductif ne sont accessibles que dans des configurations académiques, là où la solution analytique du problème est généralement connue. Le fait de ne pas connaître ces densités, nous empêche d'échantillonner les différentes contributions.

Pour remédier à cette impasse, l'idée est d'élaborer un outil supplémentaire, qui consiste à construire un espace de chemins associé au transfert de chaleur conductif (au même sens que celui associé à la luminance) dans le but d'échantillonner les différentes contributions via des trajectoires. Autrement dit, l'idée est de remplacer la technique d'échantillonnage d'une contribution selon la méthode de Green, par l'échantillonnage d'un chemin reliant le point sonde à cette même contribution. Nous allons voir que ces chemins sont définis selon la théorie des Processus Stochastiques.

forme un processus stochastique que l'on note $(\vec{X}_t)_{t \in [0, t_f]}$ que l'on définit formellement comme ci-dessous :

Définition 2 (*Processus Stochastique*)

Un processus stochastique est une famille de variables aléatoires \vec{X}_s indexées sur le temps $t \in [0, t_f]$ avec $t_f \in]0, +\infty]$. On le note généralement $(\vec{X}_t)_{t \in [0, t_f]}$.

Une réalisation $(\vec{x}_t)_{t \in [0, t_f]}$ d'un processus $(\vec{X}_t)_{t \in [0, t_f]}$ est appelée trajectoire. Cette dénomination prend tout son sens lorsque l'on considère que \vec{x}_t représente la position de l'observable à l'instant t . Dans ce cas particulier, la réalisation d'un processus permet de décrire une trajectoire ayant pour origine le point \vec{x}_0 à l'instant 0, se "baladant" dans la géométrie durant $[0, t_f]$ et terminant sa trajectoire au point \vec{x}_{t_f} à l'instant t_f . Bien sur, cette trajectoire est entièrement décrite par le modèle physique auquel obéit l'observable.

Nous présentons dans la prochaine section comment utiliser ces processus pour échantillonner les contributions associées au transfert conductif (la température étant égale à la moyenne de ces contributions).

3.3.2 Transfert conductif et processus stochastique

3.3.2.1 Conduction en milieu infini

L'une des applications les plus remarquables des Processus Stochastiques est la capacité à exprimer la solution d'une équation aux dérivées partielles comme l'espérance d'un processus. Les premiers travaux permettant de relier processus stochastique et équation aux dérivées partielles datent de 1928, et ont été réalisés par Courant, Friedrichs et Lewy [70]. Il faudra cependant attendre les travaux de Kac et Feynman [71, 59] dans les années 50 pour établir un lien plus large dans le cas des équations différentielles paraboliques, dont fait partie l'équation de la chaleur. Le processus clé dans le cadre des équations différentielles diffusives est appelé le Mouvement Brownien¹¹ (ou encore le processus de Wiener) dont une définition formelle est proposée ci-dessous.

Définition 3 (*Processus Gaussien*)

Soit $(X_t)_{t \in [0, t_f]}$ un processus stochastique. Il est dit gaussien si chacun des vecteurs extraits est un vecteur gaussien i.e. pour tout $d \in \mathbb{N}^*$, et tout d -uplet (t_1, t_2, \dots, t_d) , le vecteur $(X_{t_1}, X_{t_2}, \dots, X_{t_d})$ est gaussien. Un vecteur est gaussien si toute combinaison linéaire de ses composantes est une gaussienne. De plus, un processus gaussien $(X_t)_{t \in [0, t_f]}$ est caractérisé en loi par ses fonctions espérance et covariance :

$$\forall s, t \in [0, t_f], m(t) = \mathbb{E}_X(X_t) \text{ et } K(s, t) = Cov(X_s, X_t) \tag{3.55}$$

Définition 4 (*Mouvement Brownien standard*)

Un processus gaussien est appelé Mouvement Brownien standard (que l'on note $(B_t)_{t \in [0, t_f]}$) si c'est un processus gaussien centré ($\forall t \in [0, t_f], m(t) = 0$), de fonction de covariance donnée par

$$\forall s, t \in [0, t_f], K(s, t) = Cov(B_s, B_t) = \min\{s, t\}$$

11. Nous utiliserons dans la suite la notation agrégée MB, pour plus de commodité.

Le Mouvement Brownien standard $(B_t)_{t \in [0, t_f]}$ n'est qu'une fonction du temps, dont la densité de probabilité de la v.a. B_t à n'importe quel temps t est une gaussienne centrée d'écart-type \sqrt{t} (voir Figure 3.14). Il tire son origine de l'équation de la chaleur en milieu infini avec une diffusivité thermique uniforme $D = 1/2$ et une condition initiale à l'instant 0,

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta T \\ T(\vec{x}, 0) = T_I(\vec{x}) \end{cases} \quad (3.56)$$

dont la solution T au point (\vec{x}, t) est exprimée comme la convolution de la gaussienne d'écart-type \sqrt{t} centrée autour de \vec{x} et de la condition initiale T_I .

L'intérêt du Mouvement Brownien réside dans la propriété¹² suivante :

Propriété 1

Pour échantillonner B_t , il est possible d'échantillonner une réalisation b_s de B_s (avec $s \in [0, t]$), puis une réalisation \tilde{b}_{t-s} de \tilde{B}_{t-s} où \tilde{B} est un MB standard indépendant de B , la somme $b_s + \tilde{b}_{t-s}$ pouvant être considérée comme une réalisation de B_t . Autrement-dit, $B_t \sim B_s + \tilde{B}_{t-s}$ avec $(s, t) \in [0, t] \times [0, t_f]$ voir Figure 3.14.

De cette propriété et en utilisant une discrétisation assez fine $(t_i)_{i \in \{1, 2, \dots, n\}}$ de l'intervalle de temps $[0, t_f]$, on voit émerger une trajectoire $\{b_{s_i}, i \in \{1, 2, \dots, n\}\}$ (b_{s_i} étant échantillonné suivant B_{s_i}) partant de l'origine $b_0 = \vec{0}$ jusqu'à atteindre la réalisation b_t de B_t comme illustré dans la Figure 3.14c.

12. Cette propriété permet d'établir la fonction de covariance du MB : Si $s < t$, alors,

$$\begin{aligned} \text{Cov}(B_t, B_s) &= \mathbb{E}_B(B_t B_s) - \mathbb{E}_B(B_t) \mathbb{E}_B(B_s) \\ &= \mathbb{E}_{B, \tilde{B}}((B_s + \tilde{B}_{t-s}) B_s) - 0 \\ &= \mathbb{E}_B(B_s^2) + \mathbb{E}_{B, \tilde{B}}(\tilde{B}_{t-s} B_s) \\ &= s - 0 \\ &= s \end{aligned} \quad (3.57)$$

où \tilde{B} est un Mouvement Brownien standard indépendant de B . Par symétrie, on retrouve $\text{Cov}(B_s, B_t) = \min\{s, t\}$.

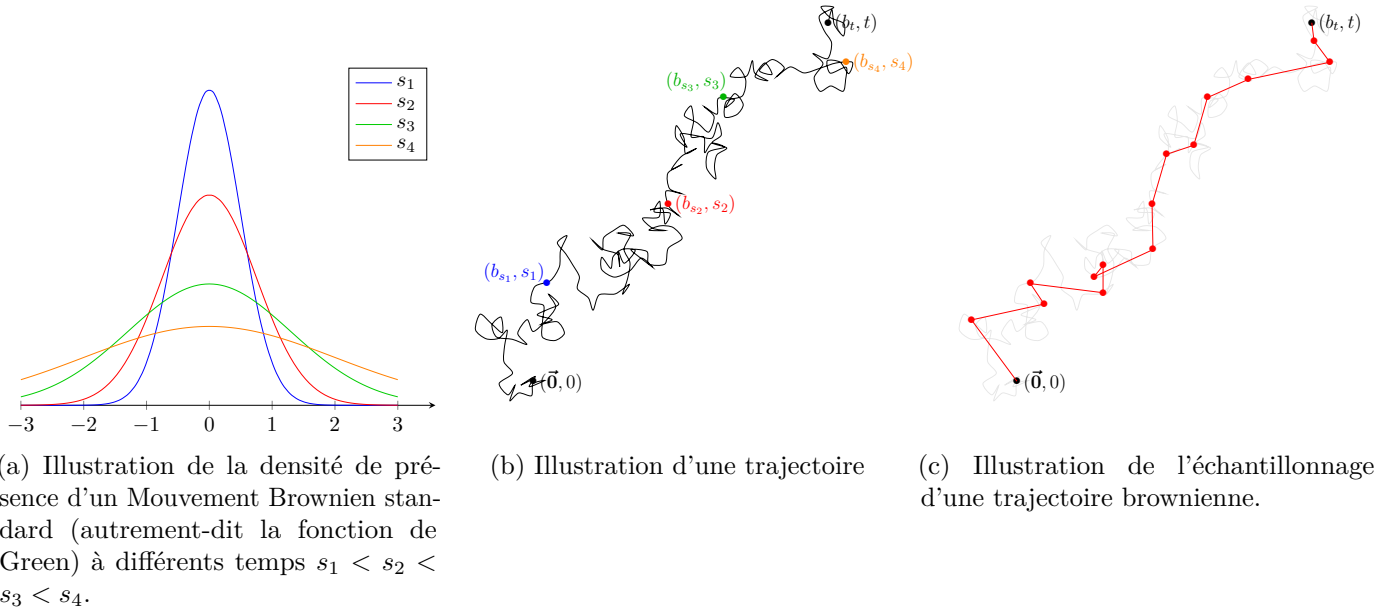


FIGURE 3.14 – Illustration d'un MB

Nous allons chercher à utiliser ces trajectoires pour échantillonner les différentes contributions via les travaux de Feynman et Kac qui ont permis d'étendre cette notion de trajectoire, en particulier dans le cas de l'EDP suivante

$$\begin{cases} \rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T - kT + S \\ T(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \end{cases} \quad (3.58)$$

où

- la densité volumique ρ , la capacité calorifique C et la conductivité thermique λ sont uniformes,
- le coefficient $k \equiv k(\vec{x}, t)$ et la source $S \equiv S(\vec{x}, t)$ pouvant être hétérogènes,
- $D = \lambda/\rho C$ est la diffusivité thermique
- et T_I la température initiale à l'instant t_I .

La **formule de Feynman-Kac** permet d'écrire la température T comme une espérance :

$$T(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_X \left(\begin{array}{l} \underbrace{\exp\left(-\int_{t_I}^t k(\vec{X}_s, s) ds\right)}_{\text{atténuation exponentielle sur } [t_I, t]} T_I(\vec{X}_{t_I}) \\ + \int_{t_I}^t \underbrace{\exp\left(-\int_s^t k(\vec{X}_{s'}, s') ds'\right)}_{\text{atténuation exponentielle sur } [s, t]} ds S(\vec{X}_s, s) \end{array} \right) \quad (3.59)$$

où le MB non standard $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ est défini tel que

$$\forall s \in [t_I, t], \quad \vec{X}_s = \vec{x} + \sqrt{2D} B_{t-s} \quad (3.60)$$

Ce processus $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ n'est qu'une fonction du temps, dont la densité de probabilité de \vec{X}_s à n'importe quel temps $s < t$ est une gaussienne centrée autour de \vec{x} d'écart-type $\sqrt{2D(t-s)}$ (la densité de \vec{X}_t est un Dirac en \vec{x}). Cette espérance permet alors d'interpréter la température T au point \vec{x} à l'instant t comme résultant :

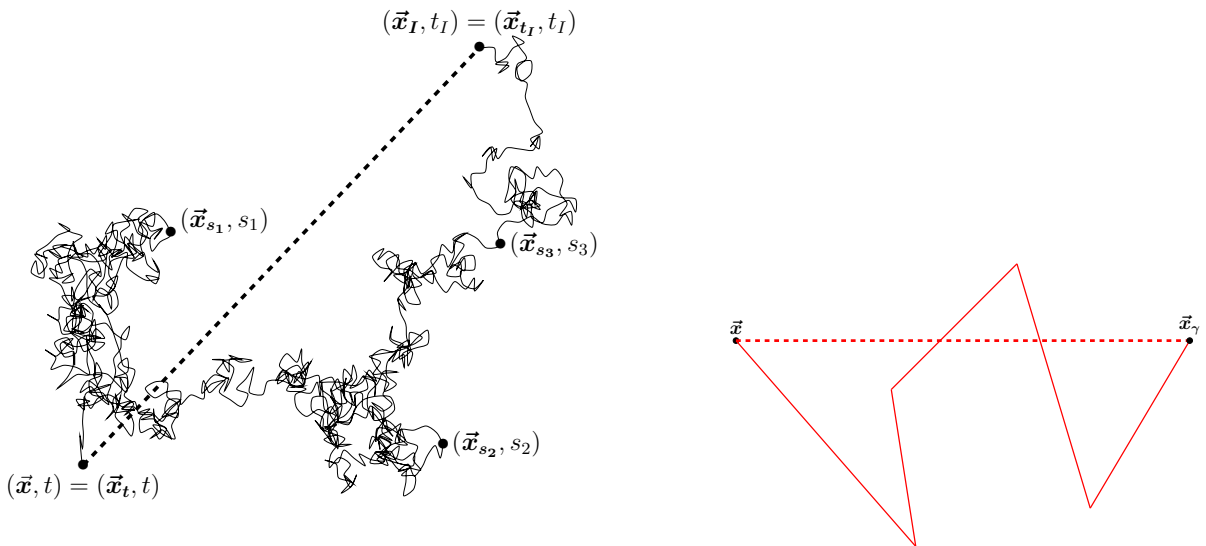
- des températures initiales prises au bout de chaque trajectoire suivant \vec{X}_{t_I} ,
- et des sources rencontrées tout le long de la trajectoire,

toutes ces contributions étant atténuées exponentiellement en fonction du coefficient k rencontré le long de la trajectoire et du temps qui les sépare de t .

Remarquons que si l'on remplace la source S par kT_R et k par $\zeta/\rho C$, alors l'équation (3.58) devient similaire à l'équation conducto-radiative en milieu infini.

3.3.2.2 Lien entre Processus Stochastique et méthode de Green

Une illustration en milieu infini d'une telle trajectoire est présentée dans la Figure 3.15a.



(a) Conduction en milieu infini : Représentation d'une trajectoire d'un Mouvement Brownien non standard $(X_s)_{s \in [t_I, t]}$ en milieu infini de dimension deux, partant de la position \vec{x} à l'instant t jusqu'à la position \vec{x}_I à l'instant t_I . Nous avons représenté cinq points le long de cette trajectoire au instant $t > s_1 > s_2 > s_3 > t_I$. Dans ce cas particulier, la fonction de Green G_S est connue, et la réalisation associée est représentée en pointillé noir.

(b) Rayonnement en milieu infini : Représentation d'un chemin optique partant du point d'émission \vec{x} et terminant sa trajectoire au point d'absorption \vec{x}_γ . Dans ce cas particulier, la fonction de Green G_R est connue, et la réalisation associée est représentée en pointillé rouge.

FIGURE 3.15 – Lien entre processus stochastique et fonction de Green : en conduction et en rayonnement.

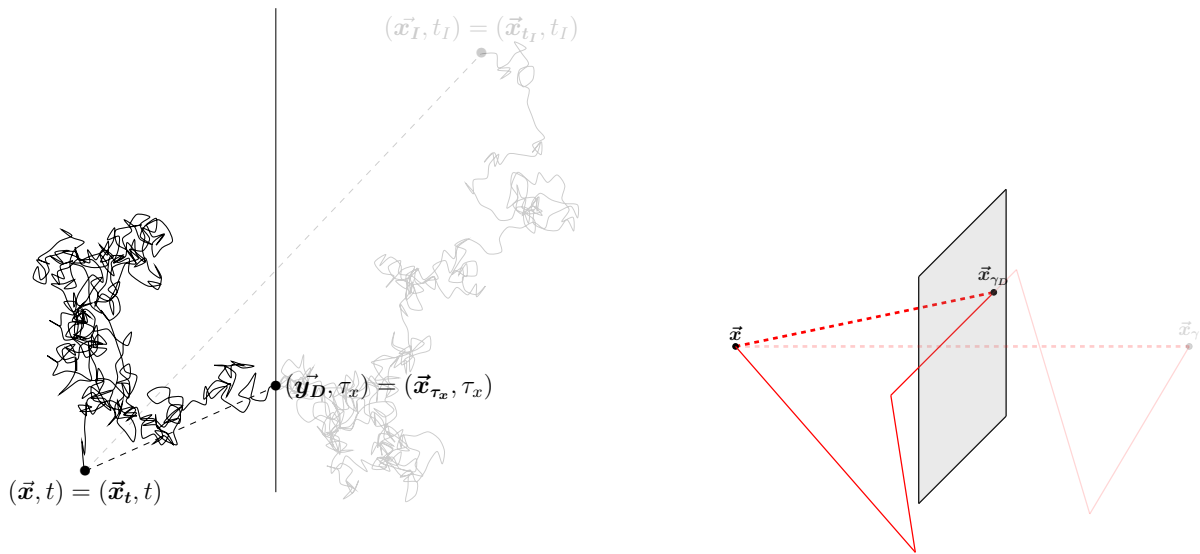
Ces deux Figures nous permettent de mettre en évidence le lien entre fonction de Green et processus stochastique : dans la figure 3.15a la FG permet d'échantillonner seulement le point final (\vec{x}_I, t_I) de la trajectoire (en trait noir pointillé) alors que le processus stochastique

permet de décrire la trajectoire toute entière $\{\vec{x}_s; s \in [t_I, t]\}$ i.e. connaître la position à tout temps $s \in [t_I, t]$ (en trait noir plein). La "similitude" avec le transfert radiatif est naturelle figure 3.15b : la FG permet d'échantillonner le point d'absorption \vec{x}_γ (en trait rouge pointillé) et le processus définit la trajectoire (le chemin optique) du point de départ \vec{x} au point \vec{x}_γ en décrivant le chemin tout entier (en trait rouge plein).

A ce stade, pour pouvoir échantillonner les contributions associées au processus conductif du modèle (3.27), il ne nous reste plus qu'à traiter le cas des conditions de bord : la condition de Dirichlet et de Robin.

3.3.2.3 Prise en compte des frontières et couplage conducto-convecto-radiatif

Dans notre cas d'étude, Eq. 3.27, le domaine est constitué d'un bord avec différentes conditions comme Dirichlet ou Robin. Cette frontière va impacter le comportement du processus en fonction de la condition imposée au bord. Pour comprendre comment le processus est impacté, nous reprenons la configuration milieu infini précédente et rajoutons une frontière. Les trajectoires obtenues précédemment n'ont plus de sens dans cette nouvelle configuration (voir Figure 3.16).



(a) Conduction avec frontière : Représentation de la trajectoire d'un Mouvement Brownien non standard $(X_s)_{s \in [t_I, t]}$ en dimension deux avec une frontière avec condition de Dirichlet, partant de la position \vec{x} à l'instant t . La trajectoire rencontre pour la première fois la frontière en \vec{y}_D à l'instant τ_x . Dans ce cas particulier, la fonction de Green G_S est connue, et la réalisation associée est représentée en pointillé noir.

(b) Rayonnement avec frontière : Représentation du chemin optique présenté dans la Figure 3.15b où nous avons ajouté une frontière supplémentaire avec condition de Dirichlet. La trajectoire partant du point \vec{x} est stoppée au point \vec{x}_{γ_D} . La réalisation associée est représentée en pointillé rouge.

FIGURE 3.16 – Lien entre processus stochastique et fonction de Green : en conduction et en rayonnement.

Dans la figure 3.16a, la trajectoire traverse pour la première fois la frontière en (\vec{y}_D, τ_x) puis atteint le point (\vec{x}_I, t_I) de l'autre coté de la frontière (le temps t_D est appelé *temps de*

premier passage). De manière similaire à notre pratique en rayonnement (voir fig.3.16b), on "postule" que tant que la trajectoire n'a pas rencontré la frontière, elle n'a aucune raison d'être différente de celle qu'on aurait obtenu en milieu infini (la "particule" est aveugle et sans mémoire), et c'est seulement au contact de la frontière qu'elle est déformée en fonction du type de condition de bord imposé : Dirichlet, Robin, Neumann pour la conduction et miroir spéculaire, BRDF, ... pour le rayonnement.

Nous continuons de noter $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ le processus en question, et écrivons la **formule de Feynman-Kac** suivante :

$$T(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_X \left(\begin{array}{l} e^{-\int_{\tau_X}^t k(X_s, s) ds} q_S(X_{\tau_X}, \tau_X) \\ + \int_{\tau_X}^t k(X_s, s) e^{-\int_s^t k(X'_s, s') ds'} dS T_R(X_s, s) \end{array} \right) \quad (3.61)$$

que l'on réécrit comme,

$$T(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_X \left(\int_{-\infty}^t k(X_s, s) e^{-\int_s^t k(X'_s, s') ds'} dS \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(s < \tau_X) q_S(X_{\tau_X}, \tau_X) \\ + \mathcal{H}(s > \tau_X) T_R(X_s, s) \end{array} \right) \right) \quad (3.62)$$

où

- $\tau_X \equiv \tau_X(\vec{x}, t)$ est une variable aléatoire associée au processus $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ et est défini comme l'instant où la trajectoire atteint la frontière

$$(\partial\Omega_D \times [t_I, t]) \cup \left(\overset{\circ}{\Omega}_{F_I} \times [t_I, t] \right) \cup \left(\overset{\circ}{\Omega}_{F^\infty} \times [t_I, t] \right) \cup (\Omega_S \times \{t_I\})$$

Autrement-dit, τ_X correspond à l'instant où la trajectoire rencontre pour la première fois soit la condition de Dirichlet sur $\partial\Omega_D$, soit l'un des domaines fluide dans $\overset{\circ}{\Omega}_{F_I} \cup \overset{\circ}{\Omega}_{F^\infty}$ soit le temps t_I dans $\overset{\circ}{\Omega}_S$.

- $k = \zeta / \rho C$,

$$\bullet \quad q_S(\vec{x}, t) = \begin{cases} T_I(\vec{x}, t), & \vec{x} \in \bar{\Omega}_S \\ +T_D(\vec{x}, t), & \vec{x} \in \partial\Omega_D \\ +T_{F_i}(\vec{x}, t), & \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F_i} \\ +T_{F^\infty}(\vec{x}, t), & \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega}_{F^\infty} \end{cases}$$

L'algorithme de MC issu de l'équation (3.62) consiste à échantillonner une réalisation du processus $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$, déterminer le temps τ_x correspondant, échantillonner un temps s suivant une loi exponentielle, puis si $s < \tau_x$ alors on récupère la température q_S à la position x_{τ_x} au temps τ_x comme poids de MC, sinon on récupère la température radiative T_R à la position x_s au temps s comme poids de MC.

3.3.2.4 Description de la procédure d'échantillonnage du processus conductif

Comme pour la méthode de Green, le processus conductif $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ n'est généralement pas connu car il dépend de la géométrie et du type de condition imposé aux bords. En revanche, il devient possible d'échantillonner une trajectoire suivant $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ de façon **approchée** (voir Figure 3.17) dont nous rappelons la construction : Traditionnellement,

ce qui est fait dans la littérature consiste à échantillonner une *trajectoire approchée* via la fonction de Green de la conduction G_S en milieu infini, nécessitant une discrétisation temporelle assez fine de l'intervalle de temps $[t_I, t]$ notée $(t_n)_{n \in \{0,1,\dots,N\}}$ avec $t_0 = t$ et $t_N = t_I$ et une suite de positions $(\vec{x}_n)_{n \in \{0,1,\dots,N\}}$ telles que $\vec{x}_0 = \vec{x}$, le point \vec{x}_{n+1} est échantillonné à l'aide d'une gaussienne centrée autour de \vec{x}_n d'écart-type $\sqrt{2D(t_n - t_{n+1})}$. Nous parlerons d'un saut du point \vec{x}_n à l'instant t_n au point \vec{x}_{n+1} à l'instant t_{n+1} (voir Figure 3.14c). Après chaque saut, trois issues sont possibles :

- soit on atteint la condition initiale et on retient la température initiale en \vec{x}_N ,
- soit on atteint une source radiative et on retient la température radiative à la position et l'instant correspondant,
- soit on atteint la frontière $\partial\Omega_S$,

A cette frontière $\partial\Omega_S$, la littérature propose différentes techniques pour prendre en compte les conditions de bords [63, 72, 73]. Nous ne nous attardons pas sur cette question, car notre choix va porter sur une autre technique d'échantillonnage du processus $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ que nous décrirons dans la section 3.4. La différence majeure, est qu'au lieu de discrétiser le temps et d'échantillonner la nouvelle position selon une gaussienne (la longueur des sauts étant variable), nous choisissons de contraindre la longueur des sauts suivant un paramètre noté δ , le temps étant quant-à lui non discrétisé.

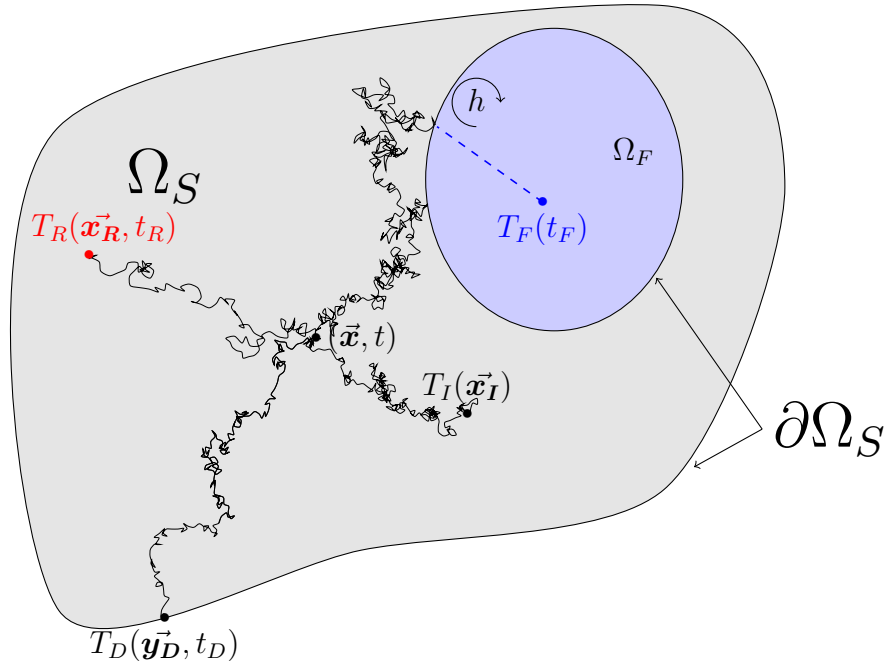


FIGURE 3.17 – Illustration de quatre trajectoires associées au processus conductif, représentant les quatre contributions pouvant être retournées : la condition initiale T_I au point \vec{x}_I , la température radiative T_R au point (\vec{x}_R, t_R) , la température du fluide T_F au temps t_F et la température imposée à la frontière T_D au point (\vec{y}_D, t_D) . Nous représentons ici, sans perte de généralité, une seule cavité fluide.

3.3.2.5 Éléments de conclusion sur les processus

Finalement, l'avantage indéniable de la méthode de Feynman-Kac par rapport à celle de Green, en dehors du fait qu'elle permet de formaliser la pensée en espace de chemins, est qu'il devient possible de construire des trajectoires approchées (de la trajectoire réelle) du processus conductif. En combinant ce processus conductif $(\vec{X}_s)_{s \in [t_I, t]}$ et les v.a Θ_R et Θ_{F_i} , on est en mesure d'échantillonner parmi les contributions, celles que nous ne pouvons pas échantillonner selon la méthode de Green (les processus associés à la convection et au rayonnement n'ont pas été travaillés ici, la méthode des fonctions de Green fournissant une technique d'échantillonnage très efficace. Rappelons qu'il est tout à fait envisageable de décrire les deux autres transferts en processus et ainsi obtenir un échantillonnage qui combinerait les trois processus conductif, convectif et radiatif).

Malheureusement, la mise en œuvre de cette trajectoire diffusive approchée, qui reste simple dans des géométries académiques¹³, sans frontière décrite par l'équation (3.58), devient rapidement impraticable lorsque la géométrie nécessite une description de type CAO. Pour contourner cette impasse, nous choisissons d'employer un modèle approché de la conduction

13. Par configuration académique, nous désignons des configurations très fréquemment référencées, bien étudiées, et donnant lieu à des résultats classiques exprimés le plus souvent sous forme analytique

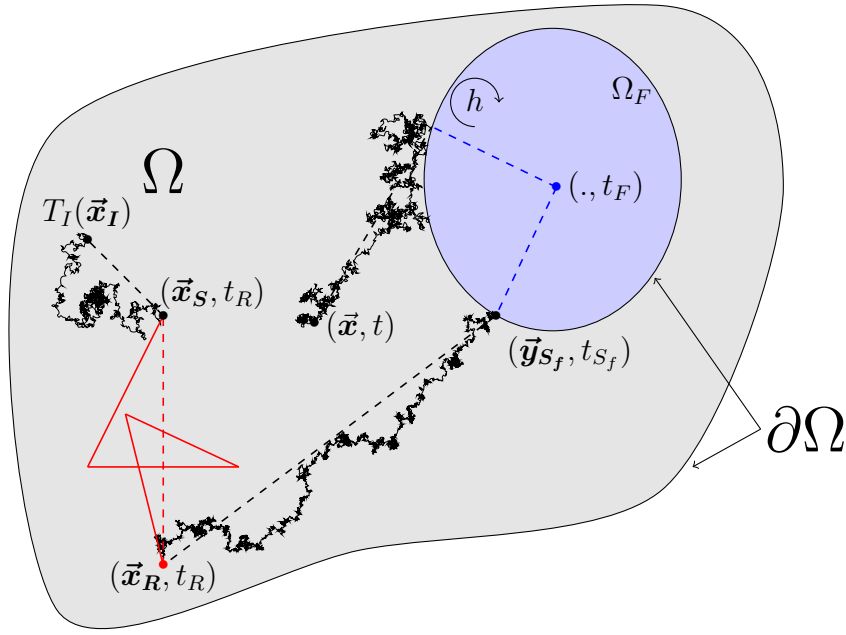


FIGURE 3.18 – Illustration d’une réalisation selon la méthode de Green (en pointillé) et d’une trajectoire (en trait plein), avec comme origine le point (\vec{x}, t) , associé au modèle (3.7) dont la contribution est la condition initiale T_I au point \vec{x}_I : les deux réalisations se sont d’abord propagées par conduction dans le domaine solide, jusqu’à atteindre le domaine fluide (la trajectoire a atteint plusieurs fois la frontière fluide, a été réinjectée dans le domaine fluide à chaque fois jusqu’à d’être absorbée par le fluide). Une fois dans le fluide, elles se sont propagées par convection, selon G_F , jusqu’à atteindre la frontière solide au point (\vec{y}_S, t_S) . De nouveau dans le solide, elles se sont propagées par conduction jusqu’à atteindre une source radiative en (\vec{x}_R, t_R) , puis se sont propagées par rayonnement jusqu’à être absorbées au point (\vec{x}_S, t_S) dans le solide, pour finalement atteindre par conduction le point (\vec{x}_I, t_I) . La contribution à la température $T(\vec{x}, t)$ est la condition initiale $T_I(\vec{x}_I)$ (la trajectoire est obtenue à partir de la trajectoire approchée en ayant choisi une discrétisation assez fine !).

(voir section 3.4.1) qui hériterait, au même titre que le rayonnement, des outils issus de la communauté de la synthèse d’image.

3.4 Proposition alternative d’échantillonnage du processus conductif

3.4.1 Introduction

Nous venons de montrer, contrairement aux transferts thermiques par rayonnement et convection (linéarisés), qu’il est compliqué de construire la fonction de Green et le processus

stochastique conductif en géométrie complexe. Ne pas connaître le propagateur a de lourdes conséquences du point de vue de la résolution numérique : sans ce propagateur, il est impossible de construire une méthode de résolution exacte (i.e calculer numériquement ou analytiquement la solution de l'EDP), et ceci, quelque soit la méthode numérique employée.

Pour contourner cette impasse, l'idée est de remplacer le modèle d'origine par un modèle approché continu élaboré à partir d'un paramètre que nous noterons δ . Pour que ce modèle approché soit acceptable, il doit être consistant i.e. que l'erreur commise entre la solution approchée \tilde{T}_S et la solution exacte T_S , tende vers zéro lorsque le paramètre δ tend vers zéro.

Une fois ce modèle approché établi et validé, nous élaborons un algorithme de Monte-Carlo, qui hérite, au même titre que le rayonnement, des outils issus de la communauté de la synthèse d'image. Ensuite, nous nous intéressons aux différents types de conditions de bord, Dirichlet et Robin dans le but d'établir un couplage entre les trois modes de transfert de chaleur : conduction, convection et rayonnement. Ce couplage sera réalisé à partir de la continuité du flux à l'interface.

3.4.2 Modèle approché en milieu infini

Nous commençons par présenter la construction du modèle approché en milieu infini, puis nous proposons une première validation de ce modèle, en évaluant les champs de température \tilde{T}_S et T_S de façon analytique via l'emploi de la méthode de la transformée de Fourier. A l'issue de ce travail théorique, nous pourrions démontrer la consistance mais également établir la vitesse de convergence de \tilde{T}_S vers T_S en fonction du paramètre δ .

Nous présentons ensuite l'élaboration du MC associé à \tilde{T}_S et nous le validons en confrontant les estimations à la solution analytique. A ce stade, il ne nous restera plus qu'à gérer les conditions de bord de type Dirichlet et Robin. Pour cela, nous verrons que c'est la continuité du flux à l'interface qui permet de gérer ces conditions.

3.4.2.1 Modèle approché en milieu infini

Nous considérons le problème conducto-radiatif en milieu infini suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C \partial_t T_S = \lambda \Delta T_S + \zeta (T_R - T_S) \quad , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ T_S(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}, t_I) \quad , \vec{x} \in \mathbb{R}^n \\ T_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma T_S(\vec{x}_\gamma, t) \quad , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \end{array} \right. \quad (3.63)$$

où

- ρ, C et λ représentent respectivement la masse volumique, la capacité calorifique et la conductivité thermique (que l'on considère uniformes pour simplifier la lecture),
- ζ est le coefficient d'échange radiatif linéarisé,
- T_R la température radiative linéarisée,
- T_S la température au point \vec{x} au temps t ,
- et T_I la condition initiale au temps t_I ,

Nous commençons par remplacer l'opérateur laplacien par une version en accroissements finis obtenue suivant la base orthonormée $\{\vec{e}_i, i \in \{1, \dots, n\}\}$,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t \check{T}_S = \lambda \left(\sum_{i=1}^n \frac{\check{T}_{S_i}^+ + \check{T}_{S_i}^- - 2\check{T}_S}{\delta^2} \right) + \zeta(T_R - T_S) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ \check{T}_S(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^n \\ \check{T}_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \check{T}_S(\vec{x}_\gamma, t) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (3.64)$$

où δ est un pas de paramètre spatial, $\check{T}_{S_i}^+(\vec{x}, t) = \check{T}_S(\vec{x} + \delta \vec{e}_i, t)$, $\check{T}_{S_i}^-(\vec{x}, t) = \check{T}_S(\vec{x} - \delta \vec{e}_i, t)$.

Il est clair que la solution \check{T}_S est dépendante du choix de la base orthonormée qui est définie de façon arbitraire. Pour cette raison, nous choisissons de nous affranchir de cette dépendance, en remarquant qu'il est tout à fait envisageable d'échantillonner l'orientation de la base de façon uniforme sur une sphère. Finalement, le modèle approché que nous retenons est le suivant,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t \tilde{T}_S = \lambda \left(\frac{2n \int_{S^{n-1}} \frac{1}{S_{n-1}} du \tilde{T}_{S,\vec{u}} - 2n\tilde{T}_S}{\delta^2} \right) + \zeta(T_R - T_S) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ \tilde{T}_S(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^n \\ \tilde{T}_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \tilde{T}_S(\vec{x}_\gamma, t) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (3.65)$$

où S_{n-1} est la surface de la sphère S^{n-1} en dimension n et $\tilde{T}_{S,\vec{u}} \equiv \tilde{T}_{S,\vec{u}}(\vec{x}, t) = \tilde{T}_S(\vec{x} + \delta \vec{u}, t)$. Nous choisissons de noter \tilde{T}_S la température solution de l'équation (3.65) pour spécifier qu'elle dépend du paramètre δ . On conservera cette notation dans les prochains chapitres.

3.4.2.2 Validation du modèle approché

Pour montrer la consistance du modèle approché et étudier la vitesse de convergence de \tilde{T}_S vers T_S en fonction de δ , nous allons calculer ces deux champs de façon analytique :

Solutions analytiques de T_S et \tilde{T}_S :

On considère le problème conducto-radiatif en milieu infini suivant

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T_S = \lambda \Delta T_S + \zeta(T_R - T_S) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^3 \\ T_S(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \\ T_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma T_S(\vec{x}_\gamma, t) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^3 \end{cases} \quad (3.66)$$

Premièrement, on commence par remplacer le modèle de conduction par le modèle

approché, puis nous exprimons la température sous une formulation intégrale,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t \tilde{T}_S = \lambda \left(\frac{6 \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du \tilde{T}_S \cdot \vec{u} - 6 \tilde{T}_S}{\delta^2} \right) + \zeta (\tilde{T}_R - \tilde{T}_S) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^3 \\ \tilde{T}_S(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \\ \tilde{T}_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du \int_0^{+\infty} k_e e^{-k_e l} dl \left(\frac{k_a}{k_e} \tilde{T}_S + \frac{k_d}{k_e} \tilde{T}_S \right)_{|\vec{x} + \vec{u}l, t} & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^3 \end{cases} \quad (3.67)$$

où k_a , k_d et $k_e = k_a + k_d$ sont les coefficients d'absorption, de diffusion et d'extinction respectivement, que nous considérons uniformes. La fonction de phase est choisie isotrope pour que le champ de température puisse être déterminé.

A ce stade, on applique la transformée de Fourier au modèle de conduction approché et on obtient,

$$\rho C \partial_t \left(\int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_S(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk \right) = \begin{pmatrix} \frac{6\lambda}{\delta^2} \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du \int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_S(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} + \delta \vec{u})} dk \\ -\frac{6\lambda}{\delta^2} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_S(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk \\ +\zeta \left(\int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_R(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk - \int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_S(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk \right) \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

que l'on réécrit de la façon suivante,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho C \partial_t \hat{T}_S(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk = \int_{\mathbb{R}^3} \begin{pmatrix} \frac{6\lambda}{\delta^2} \left(\int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du e^{i\delta \vec{k} \cdot \vec{u}} - 1 \right) \hat{T}_S(\vec{k}, t) \\ +\zeta \left(\hat{T}_R - \hat{T}_S \right) \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk \quad (3.69)$$

Ensuite, en utilisant le fait que $\{x \mapsto e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}\}_{\vec{k} \in \mathbb{R}^3}$ est une base hilbertienne, on en déduit :

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{T}_S &= \frac{6D}{\delta^2} \left(\int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{4\pi} du e^{i\delta \vec{k} \cdot \vec{u}} - 1 \right) \hat{T}_S + \frac{\zeta}{\rho C} \left(\hat{T}_R - \hat{T}_S \right) \\ \partial_t \hat{T}_S &= \frac{6D}{\delta^2} \left(\int_{\mathbb{S}_+^2} \frac{1}{2\pi} du \frac{e^{i\delta \vec{k} \cdot \vec{u}} + e^{-i\delta \vec{k} \cdot \vec{u}}}{2} - 1 \right) \hat{T}_S + \frac{\zeta}{\rho C} \left(\hat{T}_R - \hat{T}_S \right) \\ \partial_t \hat{T}_S &= \frac{6D}{\delta^2} \left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2} \sin(\theta) d\theta \cos(\delta \|\vec{k}\| \cos(\theta)) - 1 \right) \hat{T}_S + \frac{\zeta}{\rho C} \left(\hat{T}_R - \hat{T}_S \right) \\ \partial_t \hat{T}_S &= \frac{6D}{\delta^2} \left(\frac{\sin(\delta \|\vec{k}\|)}{\delta \|\vec{k}\|} - 1 \right) + \frac{\zeta}{\rho C} \left(\hat{T}_R - \hat{T}_S \right) \end{aligned} \quad (3.70)$$

où $D = \lambda / \rho C$ est la diffusivité thermique, \vec{k} la variable de Fourier. De la même façon en

appliquant la transformée de Fourier à l'équation sur \hat{T}_R , on obtient,

$$\hat{T}_R = \frac{k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)}{\|\vec{k}\| - k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)} \hat{T}_S \quad (3.71)$$

En combinant les équations (3.70) et (3.71), on écrit :

$$\partial_t \hat{T}_S = \left(\frac{6D}{\delta^2} \left(\frac{\sin(\delta \|\vec{k}\|)}{\delta \|\vec{k}\|} - 1 \right) + \frac{\zeta}{\rho C} \left(\frac{k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)}{\|\vec{k}\| - k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)} - 1 \right) \right) \hat{T}_S \quad (3.72)$$

L'équation (3.72) étant une simple équation différentielle, on en déduit que

$$\hat{T}_S(\vec{k}, t) = \hat{T}_I(\vec{k}, t) e^{-(t-t_I)/\tilde{\tau}} \quad (3.73)$$

où le temps caractéristique $\tilde{\tau}$ associé à \vec{k} vérifie

$$\tilde{\tau} = \left(-\frac{6D}{\delta^2} \left(\frac{\sin(\delta \|\vec{k}\|)}{\delta \|\vec{k}\|} - 1 \right) - \frac{\zeta}{\rho C} \left(\frac{k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)}{\|\vec{k}\| + k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)} - 1 \right) \right)^{-1} \quad (3.74)$$

et donc, la solution analytique s'écrit

$$\boxed{\tilde{T}_S(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_I(\vec{k}, t) e^{-(t-t_I)/\tilde{\tau}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk} \quad (3.75)$$

En utilisant la consistance du modèle approché, on en déduit que le temps caractéristique $\tau = \lim_{\delta \rightarrow 0} \tilde{\tau}$,

$$\begin{aligned} \tau &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(-\frac{6D}{\delta^2} \left(\frac{\sin(\delta \|\vec{k}\|)}{\delta \|\vec{k}\|} - 1 \right) - \frac{\zeta}{\rho C} \left(\frac{k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)}{\|\vec{k}\| - k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)} - 1 \right) \right)^{-1} \\ &= \left(D \|\vec{k}\|^2 - \frac{\zeta}{\rho C} \left(\frac{k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)}{\|\vec{k}\| - k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{k}\|}{k_e}\right)} - 1 \right) \right)^{-1} \end{aligned} \quad (3.76)$$

et donc, la solution analytique s'écrit

$$\boxed{T_S(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \hat{T}_I(\vec{k}, t) e^{-(t-t_I)/\tau} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk} \quad (3.77)$$

Il est à ce stade intéressant de remarquer que l'on retrouve bien le temps caractéristique en conduction pure (lorsque $\zeta = 0$) : $\tau = 1/D\|\vec{k}\|^2$ et que $\tilde{\tau}$ converge très rapidement vers τ :

$$\frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tilde{\tau}} = -\frac{6D\|\vec{k}\|^4}{5!}\delta^2 + o(\delta^4) \quad (3.78)$$

Maintenant que les deux champs de température sont connus, nous les représentons dans la Figure 3.19 pour différentes valeurs du paramètre δ .

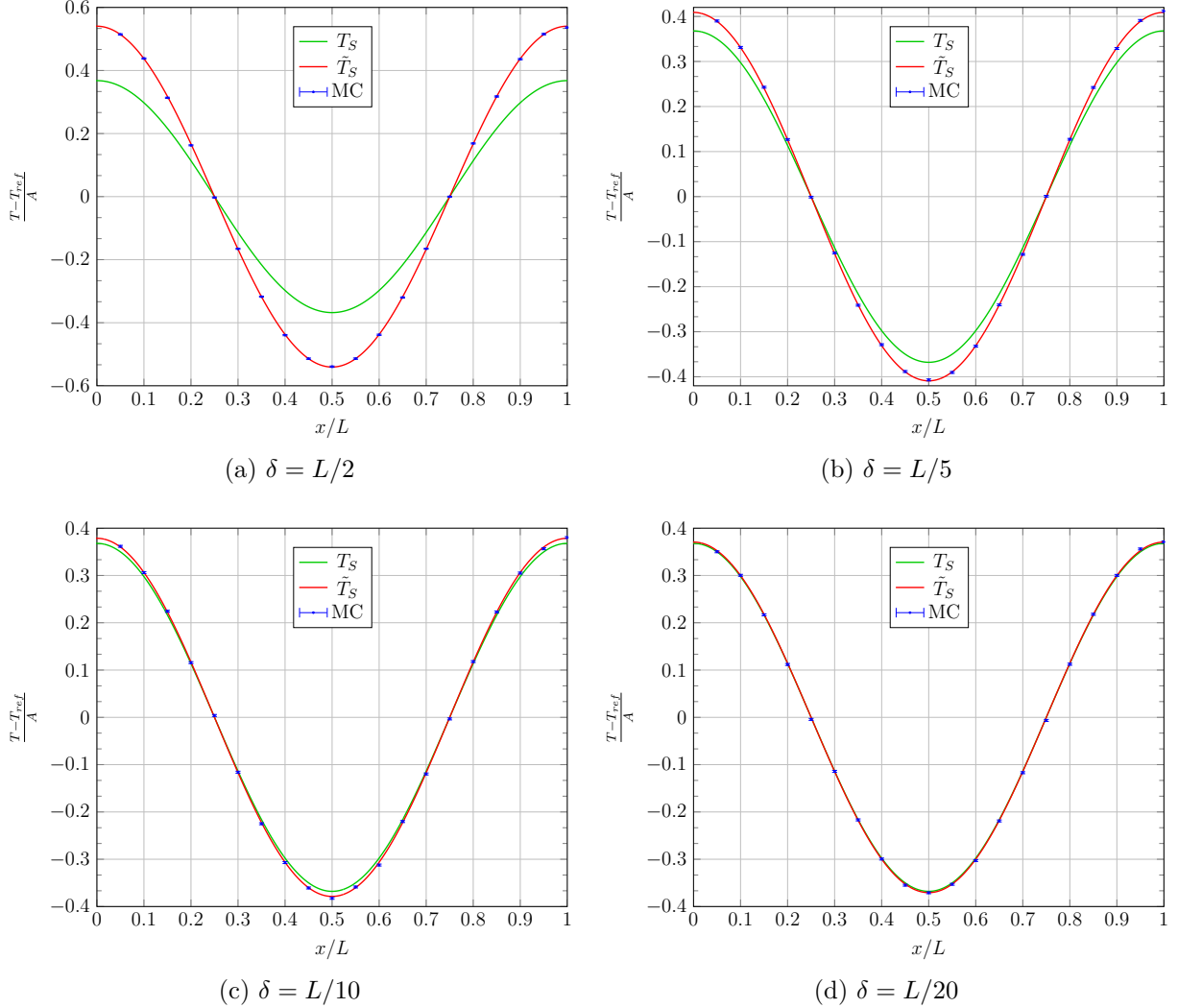


FIGURE 3.19 – Champs de température T_S solution de (3.66) avec une condition initiale en cosinus $T_I(\vec{x}) = T_{ref} + A\cos(\vec{\omega}\cdot\vec{x})$ (courbe en vert) et de \tilde{T}_S solution de (3.67) avec la même condition initiale (courbe en rouge) pour quatre valeurs de δ : $L/2, L/5, L/10$ et $L/20$. Les résultats MC obtenus à partir de l’Algorithme 10 sont représentés sous forme de points avec barres d’erreur en bleu. Dans ces quatre graphiques, les résultats sont donnés à un instant égal au temps caractéristique τ , à la position $x \in [0, L]$ et $y = z = 0$ avec $\vec{\omega} = (2\pi/L, 2\pi/L, 2\pi/L)$. Nous avons choisi la température de référence T_{ref} telle que $-D\|\vec{\omega}\|^2 = \frac{\zeta}{\rho C} \left(k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{\omega}\|}{k_e}\right) \left(\|\vec{\omega}\| - k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{\omega}\|}{k_e}\right) \right) - 1 \right)$ avec $k_d = 0$.

A travers cette figure, on constate qu’elle met en évidence deux points importants :

- Premièrement, elle illustre parfaitement la consistance du modèle et montre que \tilde{T}_S est une approximation raisonnable de T_S à condition que le paramètre δ soit de l'ordre du vingtième de la longueur caractéristique.
- Deuxièmement, en jouant sur les différents paramètres physiques du problème, nous avons constaté que le paramètre δ influence seulement la diffusion et que le rayonnement est estimé de façon exacte ! Autrement-dit, si le rayonnement domine la conduction, i.e $-D\|\vec{\omega}\|^2 \ll \frac{\zeta}{\rho C} \left(k_a \arctan\left(\frac{\|\vec{\omega}\|}{k_e}\right) / \left(\|\vec{\omega}\| - k_d \arctan\left(\frac{\|\vec{\omega}\|}{k_e}\right)\right) - 1 \right)$, alors \tilde{T}_S est une excellente approximation de T_S même pour un choix de paramètre δ très grand.

Il ne nous reste donc plus qu'à présenter la construction du Monte-Carlo issu de l'équation (3.65). Pour cela, nous allons procéder en deux étapes : nous commençons par considérer seulement la conduction puis nous prendrons en compte le couplage avec le rayonnement.

3.4.2.3 Monte-Carlo et modèle approché : marche sur δ -sphere

L'Eq. (3.65), où nous choisissons $\zeta = 0$, est une équation différentielle ordinaire (EDO) et la *formule de Duhamel* permet d'exprimer \tilde{T}_S sous une formulation intégrale

$$\tilde{T}_S(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\tau > t) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(\tau < t) \int_{S^{n-1}} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \tilde{T}(\vec{x} + \delta\vec{u}, t - \tau) \end{array} \right\} \quad (3.79)$$

puis comme une espérance

$$\tilde{T}_S(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_{\mathcal{T}} \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathcal{T} - t) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t - \mathcal{T}) \mathbb{E}_{\vec{U}} \left(\tilde{T}_S(\vec{x} + \delta\vec{U}, t - \mathcal{T}) \right) \end{array} \right) \quad (3.80)$$

où $p_{\mathcal{T}}$ est la densité de probabilité de \mathcal{T} qui suit une loi exponentielle de paramètre $\alpha = 2nD/\delta^2$, $D = \frac{\lambda}{\rho C}$ est la diffusivité thermique du matériau et $p_{\vec{U}}$ la densité de probabilité de la variable aléatoire \vec{U} .

Puisque la température \tilde{T}_S au point \vec{x} à l'instant t est exprimée comme l'espérance d'une fonction linéaire d'une espérance, nous utilisons le principe de double randomisation pour exprimer la température comme une unique espérance,

$$\tilde{T}_S(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_{\vec{X}_N} \left(T_I(\vec{X}_N) \right) \quad (3.81)$$

où

- $\vec{X}_N = \vec{x} + \delta \sum_{i=0}^N \vec{U}_i$,
- $\vec{U}_0 \equiv \vec{0}$,
- $\mathcal{T}_0 = 0$,
- $N = \min \{ n \in \mathbb{N}; \sum_{i=0}^n \mathcal{T}_i > t - t_I \}$,
- $(\mathcal{T}_i)_{i \in \{0, \dots, N\}}$
- et $(\vec{U}_i)_{i \in \{0, \dots, N\}}$ deux suites de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées (i.i.d.) suivant \mathcal{T} et \vec{U} respectivement.

Algorithme 9 : Algorithme δ -sphere en milieu infini sans couplage

```
1  $\vec{x} = \vec{x}_0$  ;
2  $t = t_0$  ;
3 while  $t > t_I$  do
4   Échantillonner  $\tau$  suivant  $\mathcal{T}$  ;
5    $t = t - \tau$  ;
6   if  $t < t_I$  then
7      $w = T_I(\vec{x})$  ;
8   else
9     Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$  ;
10     $\vec{x} = \vec{x} + \delta\vec{u}$  ;
```

Remarquons que nous venons de construire le propagateur associé au modèle approché (3.65) sans le couplage avec le rayonnement, où $(\vec{\mathcal{X}}_s)_{s \in [t_I, t]}$ est le processus stochastique définissant les trajectoires avec $\vec{\mathcal{X}}_s = \vec{\mathcal{X}}_i$ où $i = \min\{j \in \mathbb{N}; s \leq \sum_{k=0}^j \mathcal{T}_k\}$. L'algorithme d'échantillonnage de $T_I(\vec{\mathcal{X}}_N)$ est décrit dans l'Algorithme 9.

Cet algorithme consiste à

- échantillonner un temps τ suivant la loi de \mathcal{T} puis
 - si $t_I > t - \tau$ alors on récupère comme poids de MC $T_I(\vec{x})$
 - si $t_I < t - \tau$, alors
 - on échantillonne \vec{u} suivant la loi de \vec{U}
 - et on récupère comme poids de MC la température $\tilde{T}_S(\vec{x} + \delta\vec{u}, t - \tau)$

Lorsque la température $\tilde{T}_S(\vec{x} + \delta\vec{u}, t - \tau)$ n'est pas connue, on la remplace par une réalisation récursive via le même algorithme au point et temps correspondant, que l'on justifie grâce au principe de la double randomisation (voir 2.1.4). Cette récursivité entraîne l'émergence d'une marche spatiale et temporelle que l'on nomme *marche sur δ -sphere*. On appellera cet algorithme, l'**Algorithme δ -sphere**.

Finalement, échantillonner une réalisation de la *marche sur δ -sphere* revient à échantillonner une trajectoire du processus stochastique $(\vec{\mathcal{X}}_s)_{s \in [t_I, t]}$ du modèle (3.65) et l'Algorithme 9 se résume à récupérer la température au bout de cette trajectoire. On retrouve la démarche proposée par Feynman et Kac, mais cette fois-ci appliquée à une équation différentielle ordinaire ! Nous allons voir dans le prochain paragraphe comment gérer le couplage avec le rayonnement.

3.4.2.4 Marche sur δ -sphere avec source radiative

Nous venons de proposer un algorithme de MC permettant de résoudre un problème purement diffusif en milieu infini. Nous proposons dans cette section de complexifier le modèle en ajoutant un couplage avec le transfert radiatif linéarisé, le milieu étant supposé

semi-transparent. Le modèle de transfert de chaleur résultant est :

$$\begin{cases} \rho C \partial_t \tilde{T}_S = \lambda \left(\frac{2n \int_{\mathbb{S}^{n-1}} \frac{1}{s_{n-1}} du \tilde{T}_{S, \vec{u}} - 2n \tilde{T} \right) + \zeta (T_R - T_S) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ \tilde{T}(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^n \\ \tilde{T}_R(\vec{x}, t) = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \tilde{T}_S(\vec{x}_\gamma, t) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (3.65)$$

On exprime alors la température \tilde{T}_S à l'aide de la formule de Duhamel sous une formulation intégrale,

$$\tilde{T}_S(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_\mathcal{T}(\tau) d\tau \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\tau > t - t_I) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(\tau < t - t_I) \left(\begin{array}{l} p_C \int_{\mathbb{S}^{n-1}} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \tilde{T}_S(\vec{x} + \delta \vec{u}, t - \tau) \\ + p_R \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \tilde{T}_S(\vec{x}_\gamma, t - \tau) \end{array} \right) \end{array} \right\} \quad (3.82)$$

où $p_\mathcal{T}$ est la densité de probabilité de \mathcal{T} qui suit une loi exponentielle de paramètre $\alpha = (2n\lambda + \zeta\delta^2)/(\rho C \delta^2)$, $p_C = (2n\lambda)/(2n\lambda + \zeta\delta^2)$, $p_R = 1 - p_C$ et $p_{\vec{U}}$ la densité de probabilité de la variable aléatoire \vec{U} . L'algorithme de Monte-Carlo qui en découle est donné ci-dessous :

Algorithme 10 : Algorithme δ -sphere en milieu infini avec couplage radiatif

```

1  $\vec{x} = \vec{x}_0$ ;
2  $t = t_0$ ;
3  $w = 0$ ;
4 while  $t > t_I$  do
5   Échantillonner  $\tau$  suivant la loi de  $\mathcal{T} \sim \mathcal{E}(\alpha)$ ;
6    $t = t - \tau$ ;
7   if  $t < t_I$  then
8      $w = w + T_I(\vec{x})$ ;
9   else
10    Échantillonner  $r$  suivant la loi uniforme sur  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
11    if  $r < p_C$  then
12      Échantillonner  $\vec{u}$  suivant la loi de  $\vec{U}$ ;
13       $\vec{x} = \vec{x} + \delta \vec{u}$ ;
14    else
15      Échantillonner  $\gamma$  suivant la loi de  $\Gamma(\vec{x} + \delta \vec{u})$ ;
16       $\vec{x} = \vec{x}_\gamma$ ;

```

Finalement, la prise en compte du couplage radiatif ne pose aucune difficulté supplémentaire.

Rappelons tout de même, que dans cette configuration milieu infini, la stratégie qui consiste à utiliser le processus stochastique $(\vec{X}_s)_{s \in [t_i, t]}$ établi dans la section 3.3.2, est praticable, extrêmement efficace et sans aucune approximation !

En revanche, alors que ce même processus devient impraticable en géométrie complexe, nous allons voir en quoi la marche sur δ -sphère reste efficace dans de telles géométries. Pour mettre cette propriété en évidence, nous continuons de complexifier le modèle en ajoutant une frontière et considérons les deux types de conditions à la limite : Dirichlet et Robin.

3.4.3 Modèle approché en géométrie confinée

3.4.3.1 Choix d'un pas de discrétisation affiné à la frontière

Nous choisissons d'affiner le pas de la *marche sur δ -sphère* lorsqu'elle se rapproche de la frontière. Ce choix est motivé par l'idée de se ramener à une marche de type Walk-on-Sphere [49]. Rappelons que la marche aléatoire, issue de Walk-on-Sphere, "saute" de la surface d'une sphère de rayon maximal incluse dans Ω_S à une autre, ceci jusqu'à atteindre la frontière. Puisque chaque sphère de rayon maximal est tangente à $\partial\Omega_S$, la frontière est épaissie d'un paramètre ϵ afin de permettre à la marche de l'atteindre. Une illustration est proposée dans la Figure 3.9. Malheureusement, nous n'avons pas d'outils informatiques qui permettraient de déterminer la distance au bord du domaine de façon indépendante¹⁴ de la géométrie. Pour cette raison, nous avons abandonné l'idée d'utiliser cette marche, et nous nous sommes concentré sur la *marche sur δ -sphère* dont la mise en œuvre permet l'emploi d'un intersecteur rayon-triangle, le bénéfice étant l'insensibilité à la complexité géométrique. La procédure d'échantillonnage est décrite ci-dessous :

1. échantillonner une direction uniformément sur la sphère notée \vec{u}_1 ,
2. construire une base orthonormée $(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n)$,
3. évaluer la distance minimale $\delta_{\partial\Omega}$ jusqu'à la frontière dans les $2n$ directions suivantes $\pm(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n)$ en utilisant l'intersecteur rayon/triangle,
4. supposer que la sphère de rayon $d = \min(\delta, \delta_{\partial\Omega})$ est bien inscrite dans le domaine,
5. la particule se déplace alors de la distance d dans la direction \vec{u}_1 ,
6. après le déplacement, la particule atteint ou non la frontière du domaine,
7. la suite dépend du type de condition aux limites imposée.

Bien sûr, cette sphère de rayon d n'est jamais vraiment inscrite dans le domaine, c'est pour cette raison que contrairement à la marche Walk-on-Sphere, la taille de nos pas doit être assez petite pour que le point 4. soit acceptable : proche de la frontière, nous commettrons toujours une erreur qui reste raisonnable si δ est assez petit.

La marche ainsi obtenue est toujours appelée *marche sur δ -sphère* et l'algorithme est décrit dans l'Algorithme 11. Cette marche vérifie la propriété suivante :

Cette marche assure que l'estimation par Monte-Carlo d'un problème de transfert thermique par conduction stationnaire, avec condition de bord de type Dirichlet, un profil de température linéaire, sur n'importe quelle géométrie complexe fermée, est sans biais i.e. exacte.

Cette propriété est fondamentale car elle nous permet de donner un critère d'acceptabilité du paramètre δ : si le pas δ est assez petit pour que l'hypothèse de linéarité soit "acceptable" en chaque sphère de rayon δ du domaine solide et puisque nous ne considérons pas de

14. le temps de calcul lié à l'échantillonnage d'un chemin est une fonction croissante de la complexité géométrique, par exemple du nombre de facettes qui compose la frontière du domaine.

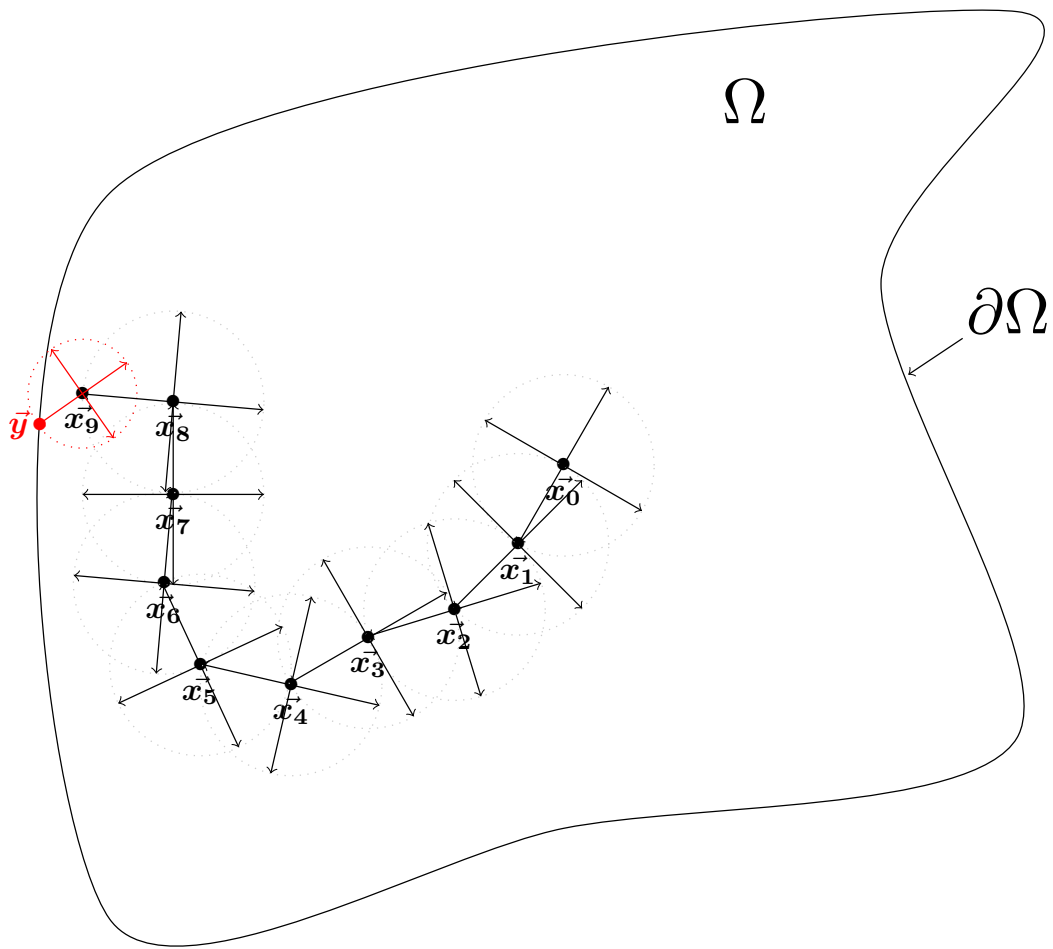


FIGURE 3.20 – *Marche sur δ -sphere*

discrétisation temporelle, alors la propriété fondamentale ci-dessus assure que la solution du modèle approché est solution du modèle de conduction.

Algorithme 11 : Algorithme δ -sphere en géométrie confinée

```

1  $\vec{x} = \vec{x}_0$ ;
2  $t = t_0$ ;
3 Sortie = false;
4 while Not Sortie do
5   Échantillonner  $2n$  directions uniformément sur la sphère notée  $\pm(\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n)$ ;
6   Échantillonner la distance  $d_i^\pm$  jusqu'à la frontière dans les direction  $\pm\vec{u}_i$ ;
7    $d = \min(\delta, (d_i^\pm)_{i \in \{1, \dots, n\}})$ ;
8    $\alpha = \frac{2nD}{d^2}$ ;
9   Échantillonner  $\tau$  suivant la loi de  $\mathcal{T} \sim \mathcal{E}(\alpha)$ ;
10   $t = t - \tau$ ;
11  if  $t < t_i$  then
12     $w = T_I(\vec{x})$ ;
13    Sortie = true;
14  else
15     $\vec{x} = \vec{x} + d\vec{u}_1$ ;
16    if  $\vec{x} \in \partial\Omega$  then
17       $w = T_b(\vec{x}, t)$ ;
18      Sortie = true;

```

3.4.3.2 Condition de bord et continuité du flux

Nous avons montré dans la section précédente qu'un échantillonnage du propagateur de la conduction revient à récupérer la température au bout d'un chemin conductif. Ce chemin conductif peut terminer sa trajectoire soit à la condition initiale, soit à une source radiative, soit à une condition de bord. En général, la température de bord n'est pas connue, sauf dans le cas particulier de la condition de Dirichlet où la température y est imposée. Lorsqu'elle n'est pas connue, nous utilisons une discrétisation de la loi de continuité du flux à l'interface entre deux milieux dans le but de l'écrire comme une somme pondérée. La continuité du flux s'écrit,

$$-\lambda \vec{\nabla} T_b \cdot \vec{n} S = \vec{j} \cdot \vec{n} S, (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \partial\Omega \quad (3.83)$$

où \vec{n} est la normale entrante dans le domaine solide et \vec{j} est un vecteur densité surfacique de flux. Comme pour le modèle d'origine, on considère une discrétisation spatiale de la continuité du flux :

$$-\lambda \frac{T_\delta - T_b}{\delta} = \vec{j} \cdot \vec{n}, (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \partial\Omega \quad (3.84)$$

où T_δ est la température située à une distance δ du bord suivant la normale entrante au domaine.

En pratique, cette stratégie ne fonctionne pas toujours car il est possible qu'en se déplaçant de δ vers l'intérieur du domaine, on intercepte une nouvelle fois le bord. Dans ce cas là, on choisit de se déplacer d'une distance égale à la moitié de la distance maximale pouvant être parcourue suivant la normale entrante au domaine.

Le vecteur densité surfacique de flux \vec{j} est donné selon le type de condition de bord, ce qui permet d'écrire T_b comme une somme pondérée : pour la *Condition de bord de type Robin*, le vecteur densité surfacique de flux est $\vec{j} = h_F(T_F - T_b)\vec{n}$ où h_F est le coefficient

d'échange convectif et T_F la température du fluide (supposée uniforme). En remplaçant \vec{j} par son expression dans l'Eq. (3.84), puis en isolant T_b , on obtient :

$$T_b = p_\delta T_\delta + p_F T_F \quad (3.85)$$

où $p_\delta = \frac{\lambda}{\lambda + h_F}$ et $p_F = \frac{h_F}{\lambda + h_F}$. La température de bord T_b est donc exprimée comme une somme pondérée des températures T_δ avec la probabilité p_δ et T_F avec la probabilité p_F . Un résultat pour le couplage conducto-convectif est présenté dans la Figure 3.21.

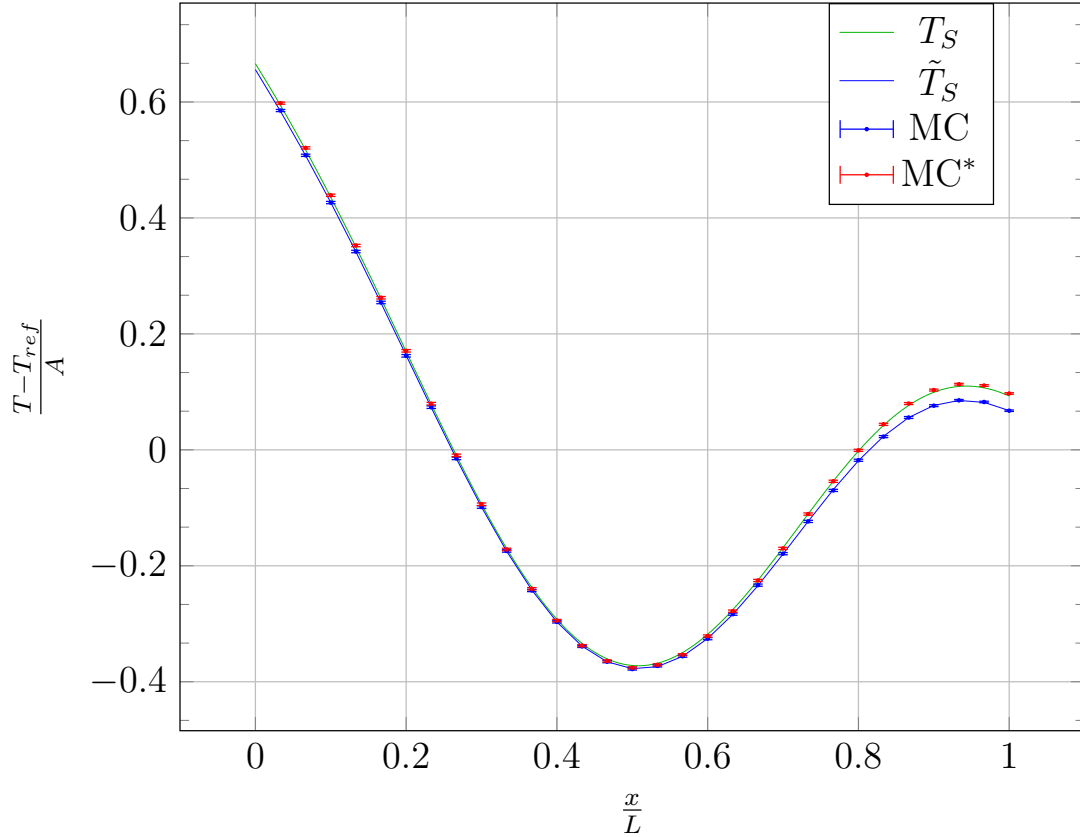


FIGURE 3.21 – Problème conducto-convectif dans un segment de longueur L avec des conditions de bord de type Robin sur chaque coté du segment (en $x = 0$ et $x = L$). Le profil de température à l'instant initial est en cosinus de période L , d'amplitude A et de moyenne T_{ref} : $T_I(x, t_I) = T_{ref} + A \cos(\frac{2\pi x}{L})$. Les températures des fluides à gauche et à droite sont T_0 et 0 respectivement. On considère le paramètre suivant $\frac{\lambda L}{h_F} = 1$. Les résultats présentés sont évalués à l'instant τ . On appelle respectivement (MC*) Méthode de MC avec tirage en exponentielle du temps de réinjection dans le solide et (MC) méthode sans tirage du temps en exponentielle. Le pas de discrétisation est $\delta = \omega/30$

Nous avons choisi d'exprimer la température de bord à partir de la continuité du flux. La continuité du flux étant instantanée, la température de bord T_b est fonction de la température située à une distance δ du bord T_δ suivant la normale entrante au même instant. C'est une conséquence du fait que la continuité du flux, équation (3.84), est indépendante de la capacité calorifique du problème. Cette indépendance entraîne forcément un biais important lorsque l'on choisit un pas de discrétisation relatif d'un vingtième, voir même d'un trentième comme

illustré dans la Figure 3.21. Une façon de prendre en compte cette capacité calorifique est de considérer que la réinjection n'est plus instantanée, mais que le temps de réinjection est tiré suivant la loi exponentielle que l'on utilise dans le milieu solide : le bénéfice de cette correction est reporté Figure 3.21 sous l'étiquette MC*. Il est également possible d'utiliser une marche issue d'une technique de type volumes finis, mais nous ne rentrerons pas dans la description de cette technique.

3.5 Conclusion : Une insensibilité en thermique linéaire

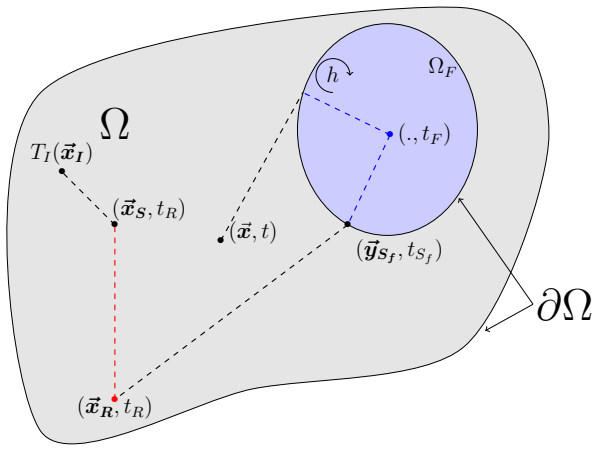
Nous avons commencé ce chapitre avec comme objectif d'écrire la température comme une espérance pour élaborer un algorithme de Monte-Carlo qui permettrait d'estimer la température solution d'un problème de **transfert thermique linéaire** couplé conducto-convecto-radiatif (3.7).

Pour cela nous avons commencé par étudier puis employer la méthode des fonctions de Green. Cette méthode d'échantillonnage est du point de vue théorique très intéressante : elle permet de réaliser un "saut de l'information" du point sonde directement à la contribution sans utiliser de trajectoire (un saut à chaque changement de mode de transfert de chaleur). Cette stratégie n'a pas pu être concluante, le calcul explicite des fonctions de Green conductive étant inaccessible en toute généralité ! Cette difficulté ne pouvant pas être contournée, nous avons choisi d'employer un nouvel outil appelé processus.

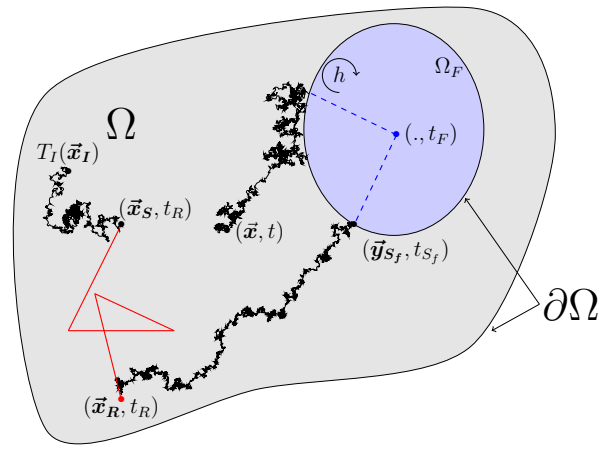
L'idée principale, est de remplacer le "saut" par une marche d'origine le point sonde et terminant sa trajectoire à l'une des potentielles contributions (voir Figure 3.15). La théorie des processus stochastiques, permet ainsi d'exprimer la température comme une espérance sur un processus : dans notre contexte, la température est exprimée comme la moyenne des températures au bout de ces trajectoires. La formule de Feynman-Kac (3.59) en est un exemple typique. Nous avons alors pu montrer qu'il devient possible d'échantillonner ces trajectoires, mais qu'en revanche la mise en œuvre est soit très lourde, soit impraticable, les temps de calcul pouvant être exorbitants

Pour cette raison, nous avons finalement opté pour un modèle approché de la conduction obtenu en remplaçant l'opérateur laplacien par un taux d'accroissement. Nous avons pu déterminer le processus associé, à l'origine de la marche sur δ -sphere. Cette marche reste praticable en géométrie complexe car elle bénéficie, au même titre que le rayonnement, des outils issus de la communauté de la synthèse d'image.

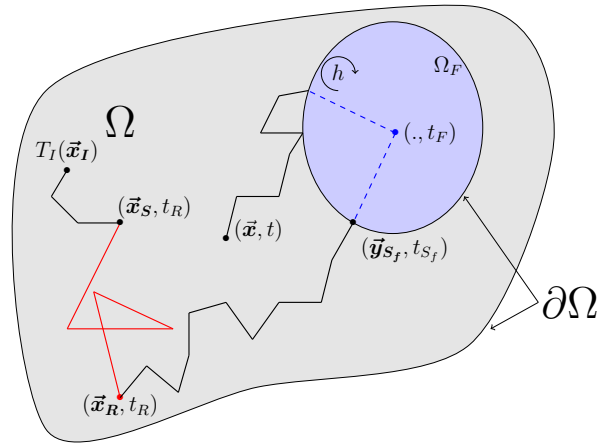
Nous récapitulons ces trois stratégies à la Figure 3.22.



(a) Méthode des Fonctions de Green



(b) Méthode des Processus Stochastiques



(c) Méthode marche sur δ -sphere

FIGURE 3.22 – Illustration des trois points de vue d’une propagation partant du point origine (\vec{x}, t) , associée aux modèles (3.7) dont la contribution est la condition initiale T_I au point \vec{x}_I : la recherche de l’information s’est d’abord propagée par conduction dans le domaine solide, jusqu’à atteindre le domaine fluide. Une fois dans le fluide, elle s’est propagée par convection jusqu’à atteindre la frontière solide au point (\vec{y}_S, t_S) . De nouveau dans le solide, elle s’est propagée par conduction jusqu’à atteindre une source radiative en (\vec{x}_R, t_R) , puis s’est propagée par rayonnement jusqu’à être absorbé au point (\vec{x}_S, t_S) dans le solide, pour finalement atteindre par conduction le point (\vec{x}_I, t_I) . Le poids de MC étant la condition initiale $T_I(\vec{x}_I)$.

Les retombés applicatives issues de ce cadre théorique sont nombreuses, permettant le calcul d’une température locale, d’une température moyenne surfacique ou volumique (moyenne spatiale et temporelle) dans des contextes ingénieur très larges : milieux poreux, récepteurs solaires, moteurs électriques, électronique de puissance, thermique des villes et des bâtiments,... Les figures 3.23, 3.24 et 3.25 donnent quelques illustrations.

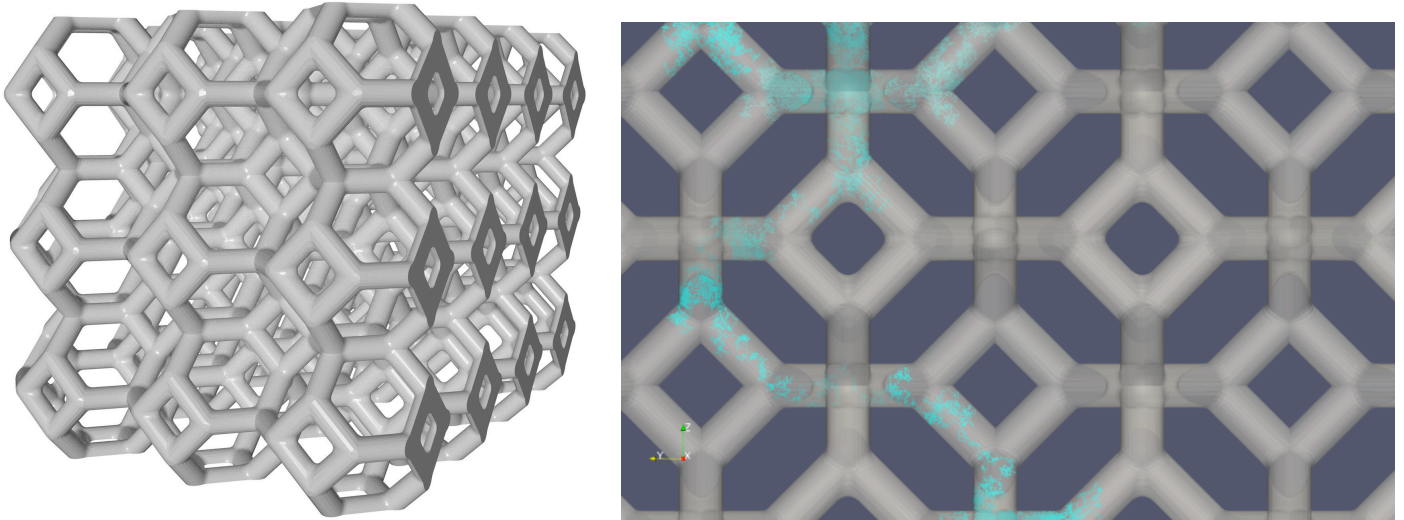


FIGURE 3.23 – Illustration d’un milieu poreux de type cellule de Kelvin et d’un chemin conducteur généré suivant l’Algorithme δ -sphere permettant le calcul de la température au sein du milieu poreux (sources [60, 61]).

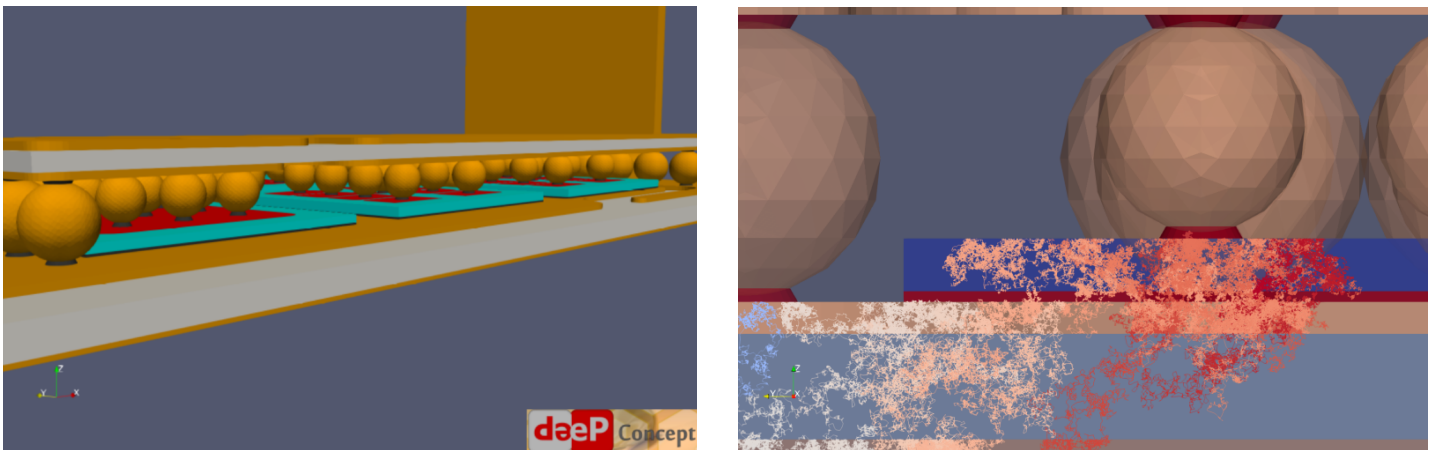


FIGURE 3.24 – Illustration d’une puce électronique développée par la start-up Deep Concept hébergée à la plateforme Prime à Tarbes lors d’un projet de R&D (avec l’autorisation de Deep Concept), et d’un chemin conducteur généré suivant l’Algorithme δ -sphere permettant le calcul d’une température de jonction au sein de la puce [21, 23].

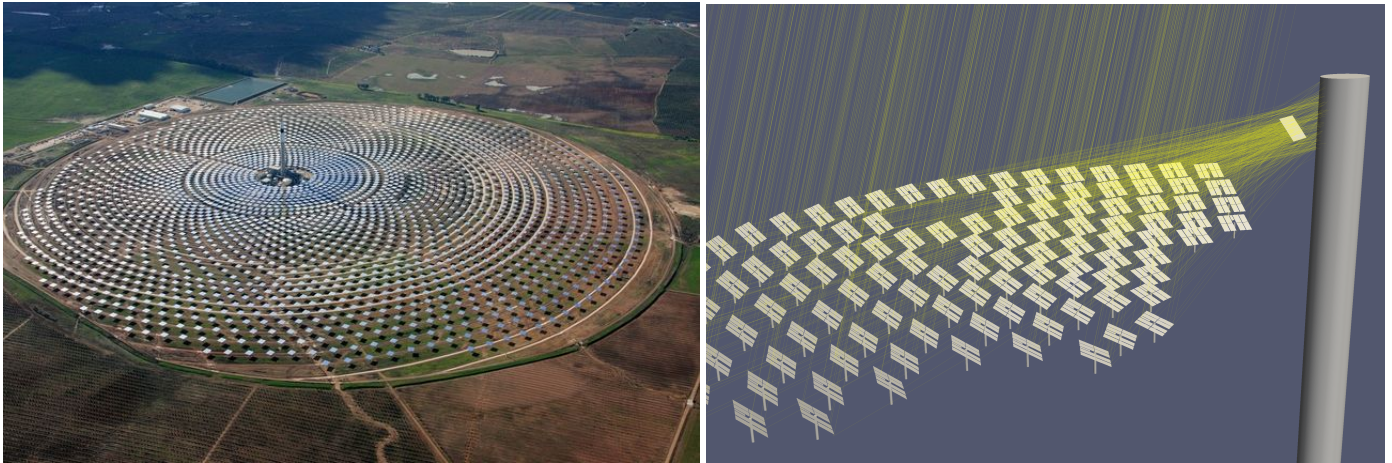
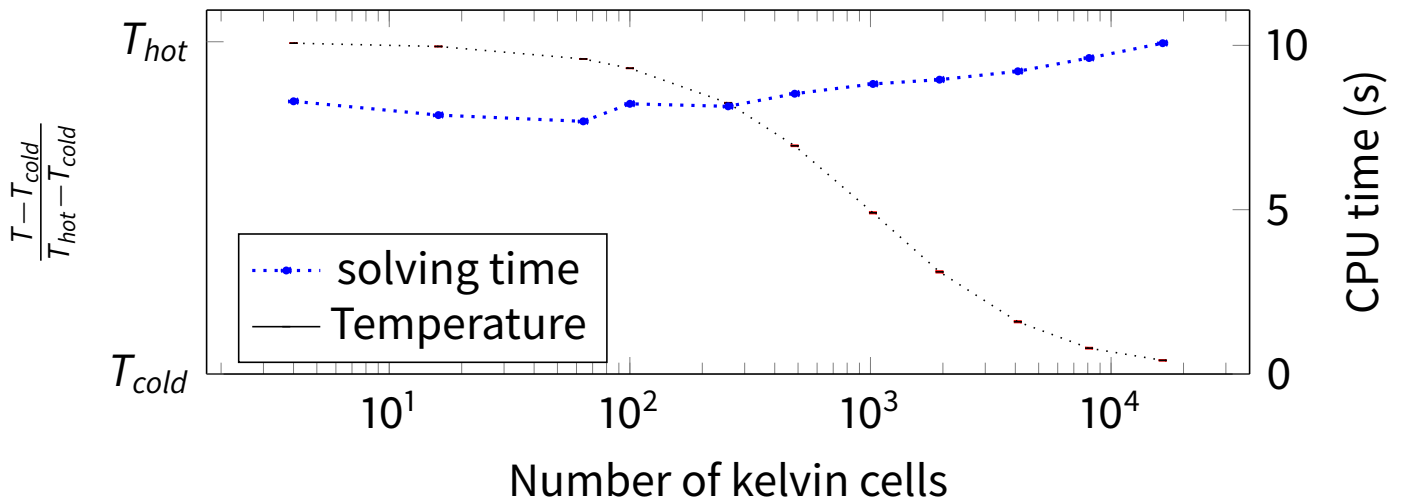
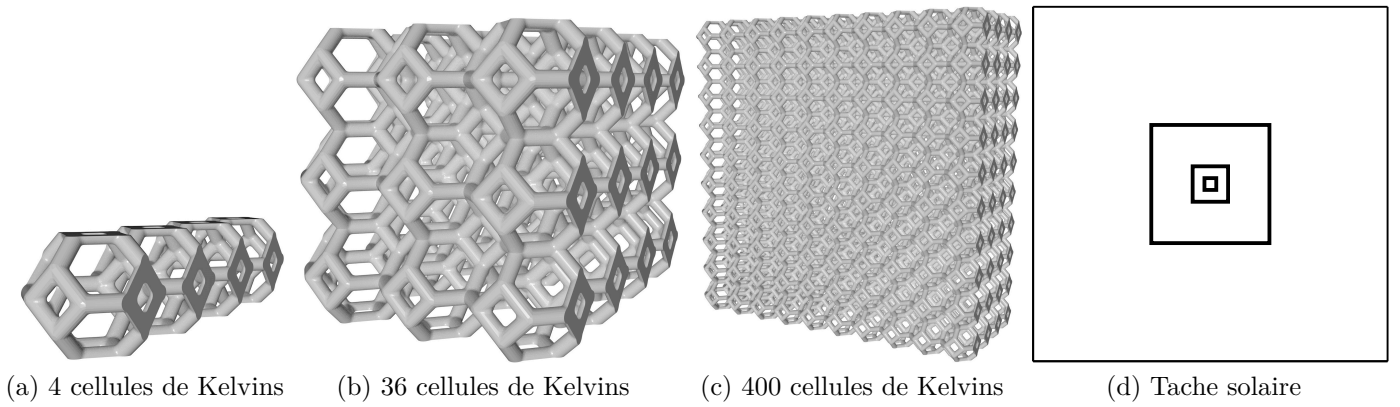


FIGURE 3.25 – Illustration d’une centrale solaire (sources [62], [74]) et d’un ensemble de chemins optiques permettant le calcul d’un flux solaire en considérant toute la complexité géométrique et physique de la centrale, champ d’héliostats et récepteur thermique au sommet de la tour.

Plus de détails concernant toute l’étendue de cette famille de travaux sont disponibles sur les deux sites web [21, 23] et [22, 75].

Pour conclure ce chapitre, nous présentons un récent résultat réalisé par Loris Ibarrart [60, 61]. Ce résultat a été obtenu dans une configuration constituée d’un échangeur poreux en plaque constitué de cellules de Kelvin (4 cellules à la traversée). Cette plaque est parcourue par un fluide initialement froid, et est éclairée par une tache solaire (qui conserve une taille fixe lorsque l’on change les dimensions de la plaque poreuse). La grandeur calculée est la température moyenne de l’air en sortie de l’échangeur par l’échantillonnage de 10000 chemins conducto-convecto-radiatifs représentant les couplages thermiques tridimensionnels au sein du poreux. Dans cet exemple, le flux radiatif incident est représenté par une température équivalent corps noir, et les écarts de température sont restreints afin de rester dans la gamme de validité de la linéarisation du rayonnement. La figure 3.26 présente ces résultats de calcul avec leurs incertitudes statistiques ainsi que les temps de calcul correspondants en fonction de la complexité de la géométrie (extension de la plaque poreuse). Le temps de calcul reste alors le même quelle que soit l’extension de la plaque, donc quel que soit le nombre de cellules poreuses prises en compte explicitement lors du calcul. On retrouve ici une insensibilité à la complexité géométrique en transfert thermique, la même insensibilité que celle observée par Najda Villefranque figures 1.5 et 1.6 en transfert radiatif.



(e) Évolution moyenne de la température et du temps de calcul pour un nombre croissant de cellules de Kelvin. Le temps de résolution est le temps nécessaire pour échantillonner 10^4 chemins aléatoires couplés dans le système.

FIGURE 3.26 – Evolution de la température du fluide sortant, du temps de chargement de la géométrie, et du temps de calcul en fonction de la complexité de la géométrie dans une simulation d'échangeur solaire. La géométrie considérée est un milieu poreux constitué d'un nombre croissant de cellules de Kelvin soumis au réchauffement d'une tache solaire et balayé par un fluide froid. Au fur et à mesure que la géométrie est déployée, une proportion croissante de la tache solaire participe au réchauffement du fluide, tandis que le débit d'entrée du fluide augmente proportionnellement à la surface d'entrée (sources [60, 61]).

Chapitre 4

Trois algorithmes de Monte-Carlo Non-Linéaire existants : une tentative de mise en oeuvre en transfert thermique

Dans ce chapitre, l'objectif est d'étendre la méthode de Monte-Carlo aux **transferts thermiques non-linéaires** tout en conservant l'ensemble des avantages observés dans le cadre linéaire, notamment cette insensibilité à la taille et au niveau de raffinement de la description par CAO (fig. 3.26) que nous avons décrite à la fin du chapitre précédent. Nous avons expliqué pourquoi, dans le Chapitre 1, cette insensibilité serait perdue si la non-linéarité était abordée à l'aide de "marcheurs" en essaim. Nous concentrons donc notre analyse de l'état de l'art sur les algorithmes de MC Non-Linéaire sans essaim que nous regrouperons en trois familles d'objectifs.

Avant de rentrer dans la lecture détaillée des algorithmes issus de ces trois familles, il est essentiel de préciser qu'on entend par Monte-Carlo Non-Linéaire la présence dans les algorithmes de deux types de non-linéarités : les non-linéarités propres à la théorie de Monte-Carlo, donc relevant de l'estimation numérique d'intégrales, indépendamment de leurs origines physiques, (emboîtement d'espérances via des fonctions non-linéaires) et les non-linéarités propres à la physique initiale (par exemple une équation de Boltzmann non-linéaire où les particules interagissent entre elles).

Selon cette distinction, les algorithmes à collisions nulles relèvent du premier type de non-linéarité : ils sont issus de la physique du transport linéaire, permettent de gérer l'hétérogénéité du coefficient d'extinction et nous verrons que même dans cette physique linéaire, l'extinction le long d'un faisceau fait apparaître selon la loi de Beer une exponentielle d'une intégrale de la section efficace. Lorsque l'on souhaitera intégrer un ensemble de faisceaux, on sera bien confronté à une intégrale d'une fonction non-linéaire (exponentielle) d'une intégrale. Les deux autres algorithmes quant-à eux, trouvent leurs origines dans la volonté de produire la solution d'un problème de physique non-linéaire (non-linéarité de la photosynthèse et non-linéarité de l'équation de Boltzmann à titre d'exemples). Cette distinction doit rester bien présente à l'esprit, dans ce qui va suivre. Dans ce chapitre, nous nous focaliserons exclusivement sur le second type, classique, des non-linéarités issues de la physique du problème.

4.1 Description plus approfondie des propositions de Galtier, Dauchet et Terrée

Nous allons faire une première tentative de résolution de problèmes de transferts thermiques non-linéaires par la méthode de Monte-Carlo. Nous commençons par un rappel détaillé de trois groupes de travaux [13], introduisant des étapes conceptuelles qui seront au coeur de notre proposition :

- l'introduction de "collisionneurs fictifs ou nuls" [76, 14, 77], via un parallèle avec le transport de particules, ces collisions nulles permettant de reporter la non-linéarité dans une probabilité de rejet (section 4.1.1) ;
- le développement en série entière de la non-linéarité [78] et la gestion de chaque monôme d'ordre n (la puissance n -ième d'une espérance) via n réalisations indépendantes (section 4.1.2) ;
- le remplacement de la probabilité de rejet (le lieu de la non-linéarité) par un seul échantillon de sa variable aléatoire associée [20] (section 4.1.3).

Nous proposons ici une illustration des répercussions applicatives de ces trois concepts avant de proposer une combinaison des trois idées (section 4.1.4) dans l'objectif d'aborder des problèmes de

- diffusion thermique (conduction de la chaleur) avec une conductivité dépendante de la température, $\lambda(T)$ (section 4.2),
- rayonnement entre surfaces opaques grises, σT^4 (section 4.3),
- condition à la limite conducto-convective avec un coefficient d'échange convectif dépendant de la température, $h_F(T)$ (section 4.4.1),
- conduction avec une capacité calorifique dépendante de la température, $C(T)$ (section 4.4.2).

Un premier résultat de notre recherche sera que, malgré leurs différences d'un point de vue thermique, ces quatre cas peuvent être abordés en adoptant la même démarche (un appel successif aux trois concepts précédents). Nous insisterons donc sur les caractéristiques communes aux quatre algorithmes résultant. L'une d'elle est malheureusement le caractère impraticable dû au trop grand nombre de branchements.

Nous clôturerons donc ce chapitre par un effort de synthèse où nous laisserons de côté la spatialisation. Chaque équation intégrale associée à l'un des quatre problèmes de transfert que nous avons étudiés deviendra alors similaire à une même équation différentielle, dont la structure bien particulière sera à l'origine des développements proposés au prochain chapitre.

4.1.1 Les algorithmes à collisions nulles

Nous présentons le fondement des algorithmes à collisions nulles (ACN) à travers l'étude de l'équation différentielle linéaire ordinaire suivante,

$$\begin{cases} y'(t) = -k(t)(y(t) - S(t)) \\ y(t_I) = y_I \end{cases} \quad (4.1)$$

Les ACN ont été initialement développés dans le cadre de la physique du transport linéaire [79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 14, 77, 76]. La question posée était de gérer les hétérogénéités

spatiales de la densité de collisionneurs le long d'une trajectoire. Mais comme dans cette famille de modèles la vitesse des particules est connue à tout instant, on peut choisir de regarder cette hétérogénéité spatiale comme une évolution temporelle de la quantité de collisionneurs vue par une particule le long de sa trajectoire. C'est cette vision temporelle que nous retenons dans l'Eq. 4.1 car nous verrons que l'essentiel de nos questions associées aux non-linéarités peuvent se discuter en écartant les dimensions spatiales, qui n'introduisent aucune difficulté spécifique. A ce stade, k ne dépend que du temps t de façon explicite, et non pas de la solution y du problème. Il s'agit donc d'une équation différentielle linéaire que l'on peut apparenter à une cinétique chimique d'ordre 1. k serait alors la *constante de vitesse*, mais nous préférons ici l'appeler *coefficient d'extinction*, d'une part pour maintenir une référence explicite à la physique du transport et d'autre part pour permettre l'utilisation d'un vocabulaire unique même lorsque nous quitterons le parallèle avec la cinétique chimique d'ordre 1 (k dépendant de y , voir la section 4.1.3). On peut retenir en tout cas que dans une pensée cinétique, k est proportionnel à la densité des partenaires de collision.

La solution de 4.1 est

$$y(t) = \exp\left(-\int_0^{t-t_I} k(t-s')ds'\right) y_I + \int_0^{t-t_I} k(t-s) \exp\left(-\int_0^s k(t-s')ds'\right) ds S(t-s) \quad (4.2)$$

que l'on peut reformuler de la façon suivante,

$$y(t) = \int_0^{+\infty} k(t-s) \exp\left(-\int_0^s k(t-s')ds'\right) ds \begin{pmatrix} \mathcal{H}(t_I > t-s)y_I \\ +\mathcal{H}(t_I < t-s)S(t-s) \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

où $\mathcal{H}(C)$ est égal à 1 si la condition C est vérifiée et 0 sinon, cette application est issue de la pensée informatique et peut être représentée mathématiquement par une fonction Heaviside.

Pour que l'équation (4.3) soit mathématiquement correcte, la fonction k est prolongée par une constante \hat{k} pour des valeurs inférieures à t_I , i.e. $\forall s \in]-\infty, t_I]$, $k(s) = \hat{k}$ où \hat{k} est un majorant positif de k , cette astuce technique est employée tout au long de ce manuscrit de façon implicite. A ce stade, il est intéressant de remarquer que si la fonction k est constante, alors il devient possible d'élaborer un algorithme de Monte-Carlo associé à y , puisque le terme $k(t-s) \exp(-\int_0^s k(t-s')ds')$ est égal à $k \exp(-ks)$ qui n'est rien d'autre que la densité de probabilité d'une loi exponentielle de paramètre k , notée \mathcal{E} . Ainsi, y s'écrit comme une espérance

$$y = \mathbb{E}_{Y_H}(Y_H) \quad (4.4)$$

avec

$$Y_H(t) = \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{E})y_I + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{E})S(t - \mathcal{E}) \quad (4.5)$$

L'algorithme d'échantillonnage de y suivant Y_H est donné dans l'Algorithme 12. Nous retrouvons la même structure que celle que nous avons utilisée au paragraphe 3.4.2 lors de la présentation des algorithmes de thermique linéaire instationnaire : on tire un temps de retour en exponentielle et on retient la valeur de S à l'instant correspondant, sauf si cet instant est situé avant la condition initiale, auquel cas on retient la valeur initiale de y .

Algorithme 12 : Fonction $F(t)$ d'échantillonnage de Y_H au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est $S(t')$, sauf si la condition initiale à été atteinte lors du retour temporel et dans ce cas $w = y_I$.

```

1 Échantillonner  $s$  suivant  $\mathcal{E}$ ;
2  $t' = t - s$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = y_I$ ;
5 else
6   |  $w = S(t')$ ;

```

Lorsque le coefficient d'extinction k n'est pas constant, le terme $k(t-s) \exp(-\int_0^s k(t-s')ds')$ est la densité de probabilité d'une loi exponentielle intégrale qui n'est généralement pas facile à échantillonner. C'est cette difficulté d'échantillonnage qui peut être contournée via l'emploi de la technique des algorithmes à collisions nulles. L'idée est d'ajouter en tout point des sections efficaces de collisionneurs fictifs, qui ne changent pas la physique du problème mais transforment l'exponentielle intégrale hétérogène en une simple exponentielle intégrale homogène : *l'idée principale est que les ACN transforment la non-linéarité de l'extinction de Beer en un problème linéaire récursif que Monte Carlo gère sans approximation*. Ici on introduit un coefficient d'extinction $k_n(t)$, fonction du temps, représentant des collisionneurs fictifs, que l'on ajoute à $k(t)$ de sorte que $k(t) + k_n(t) = \hat{k}$ avec \hat{k} un majorant de k qui ne dépend pas du temps (la densité de collisionneurs fictifs est ajustée à la densité de collisionneurs réels de sorte que l'extinction totale soit uniforme),

$$\begin{aligned}
y'(t) &= -k(t)(y(t) - S(t)) \\
&= -k(t)(y(t) - S(t)) + k_n(t)y(t) - k_n(t)y(t) \\
&= -\hat{k} \left(y(t) - \frac{k(t)}{\hat{k}}S(t) - \frac{k_n(t)}{\hat{k}}y(t) \right) \\
&= -\hat{k}(y(t) - S^*(t))
\end{aligned} \tag{4.6}$$

avec $S^*(t) = p(t)S(t) + (1 - p(t))y(t)$ et $p(t) = k(t)/\hat{k}$. Comme précédemment, la solution est :

$$y(t) = \exp(-\hat{k}(t - t_I))y_I + \int_0^{t-t_I} \hat{k} \exp(-\hat{k}s) ds S^*(t - s) \tag{4.7}$$

que l'on exprime sous une formulation intégrale

$$y(t) = \int_0^{+\infty} \hat{k} \exp(-\hat{k}s) ds \begin{pmatrix} \mathcal{H}(t_I > t - s)y_I \\ +\mathcal{H}(t_I < t - s)S^*(t - s) \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

et où l'on peut remplacer S^* par son expression pour obtenir

$$y(t) = \int_0^{+\infty} \hat{k} \exp(-\hat{k}s) ds \begin{pmatrix} \mathcal{H}(t_I > t - s)y_I \\ +\mathcal{H}(t_I < t - s) \begin{pmatrix} p(t - s) S(t - s) \\ +(1 - p(t - s))y(t - s) \end{pmatrix} \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

ce qui se lit comme une espérance,

$$y = \mathbb{E}_Y (Y) \quad (4.10)$$

avec

$$Y(t) = \mathcal{H}(t_I > t - \hat{\mathcal{E}})y_I + \mathcal{H}(t_I < t - \hat{\mathcal{E}}) \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p(t - \hat{\mathcal{E}})) S(t - \hat{\mathcal{E}}) \\ +(1 - \mathcal{B}(p(t - \hat{\mathcal{E}})))Y(t - \hat{\mathcal{E}}) \end{array} \right) \quad (4.11)$$

où $\hat{\mathcal{E}}$ est une loi exponentielle de paramètre \hat{k} de densité de probabilité $s \mapsto \hat{k} \exp(-\hat{k}s)$ et $\mathcal{B}(p)$ suit une loi de Bernoulli de paramètre p . L'Algorithme d'échantillonnage d'une réalisation y de Y est décrit dans l'Algorithme 13. Cet algorithme consiste à tirer un temps de retour en exponentielle pour échantillonner le prochain évènement de collision ; si cet instant est situé avant la condition initiale, alors on retient la valeur initiale de y , sinon on sélectionne avec la probabilité p une collision vraie et on retient la valeur de S , et avec la probabilité $1 - p$ une collision virtuelle, et on retient la valeur de y , tout ceci au moment de la collision.

Puisque la valeur de y est inconnue, on la remplace par un échantillonnage récursif (de Y) que l'on justifie par le principe de double randomisation. La probabilité p que la collision échantillonnée soit une vraie collision est une fonction du temps, elle intervient seulement au moment de la collision et permet de déterminer la nature de la collision : vraie ou virtuelle. Dans l'équation (4.11), la probabilité p est une fonction de t et $\hat{\mathcal{E}}$: $p \equiv p(t - \hat{\mathcal{E}})$ qui est donc une v.a. définie comme fonction d'une v.a.. Mais puisque l'espérance sur $\hat{\mathcal{E}}$ intervient en dehors de la fonction p , il n'y a aucun problème de non-linéarité, le profil de p pouvant être aussi complexe que souhaité.

Algorithme 13 : Fonction $F(t)$ d'échantillonnage récursif de Y au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle même si il est connu ($w = y_I$ ou $w = S(t')$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F au temps t' .

```

1 Échantillonner  $s$  suivant  $\hat{\mathcal{E}}$ ;
2  $t' = t - s$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = y_I$ ;
5 else
6   | Échantillonner  $r$  suivant  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
7   | if  $r < p(t')$  then
8   |   |  $w = S(t')$ ;
9   | else
10  |   |  $w = F(t')$ ;

```

Une illustration de cet algorithme est proposée Figure 4.1.

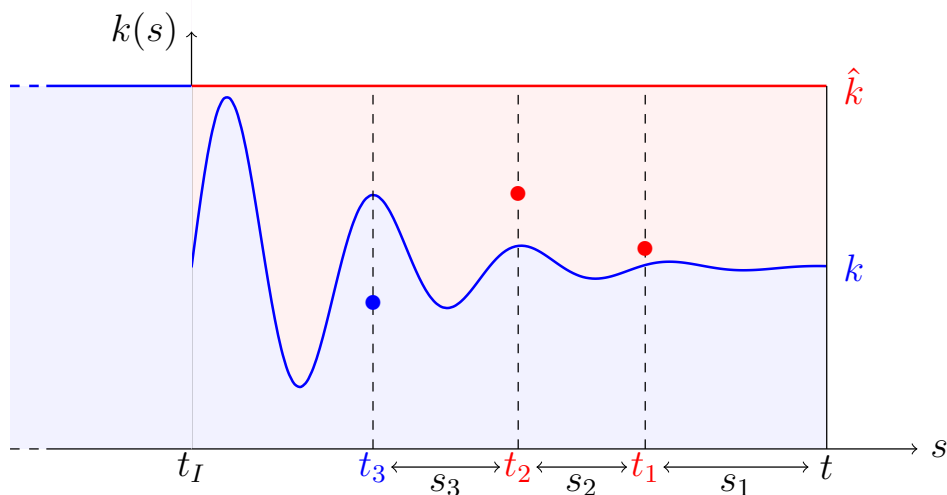


FIGURE 4.1 – L’algorithme 13 estimant $y(t)$ consiste à échantillonner une réalisation s de $\hat{\mathcal{E}}$; si $t - s$ est situé avant la condition initiale t_I alors on retient la valeur initiale de y comme poids de MC, sinon on échantillonne r uniformément sur $[0, 1]$, si $r < p(t - s)$ alors on retient $S(t - s)$ comme poids de MC, sinon on échantillonne une réalisation de $Y(t - s)$ et on la retient comme poids de MC. Dans cette figure, nous avons échantillonné s_1 suivant $\hat{\mathcal{E}}$, ce qui a conduit à un rejet (la collision à l’instant t_1 correspondait à la partie de l’extinction associée aux collisionneurs virtuels, entre k et \hat{k}), puis suite à ce rejet nous avons échantillonné s_2 ainsi qu’un nouveau type de collision à t_2 , qui a encore été fictive, puis s_3 et un type de collision à t_3 , qui cette fois a été une collision réelle, et c’est finalement $S(t_3)$ qui a été retenu.

Nous discuterons dans la section 4.1.3 d’une classe de problèmes non-linéaires dont la non-linéarité se traduit par la dépendance du coefficient d’extinction k à la grandeur, les ACN permettant de reporter la non-linéarité dans la probabilité $p = k/\hat{k}$. Cette probabilité p dépendra alors non-linéairement de y , l’écriture en une seule espérance étant rendue possible grâce à la technique présentée dans la section suivante.

4.1.2 Estimation de l’espérance d’une fonction non-linéaire d’une espérance

Le photobioréacteur étudié par J. Dauchet est une enceinte cylindrique fermée dans laquelle des micro-organismes (micro-algues) se multiplient par photosynthèse dans un milieu aqueux parfaitement mélangé à tout instant. De ce milieu est constamment extrait de la biomasse, pendant qu’il est suffisamment alimenté en eau, en CO_2 , en autres nutriments, et en lumière pour que cette biomasse se renouvelle au plus vite. Aujourd’hui, l’homogénéisation et l’optimisation des conditions thermo-chimiques dans le réacteur (température, salinité, concentration en nutriment, concentration de biomasse) en vue de maximiser la croissance des micro-organismes n’est plus une difficulté : les technologies nécessaires sont totalement maîtrisées. En revanche, il n’en est pas de même pour son éclairage. C’est l’objet de la thèse de J. Dauchet. La lumière est la source primaire et unique d’énergie des micro-organismes dans le réacteur. La géométrie de ce dernier est prévue pour que, sachant les propriétés optiques du milieu de croissance, l’absorption de la lumière fournie et surtout le taux de

croissance de biomasse soient maximales. Cette optimisation n'est pas une tâche évidente, car le rendement de la photosynthèse est variable, et dépend en particulier de l'éclairage local qui lui même dépend de la concentration en micro-organismes. Il n'y a donc pas proportionnalité entre l'éclairage absorbé et la production finale de biomasse.

Dans cette étude, la grandeur d'intérêt est le taux de croissance de biomasse global $R(C)$, qui dépend de la concentration C . Ce taux global n'est rien d'autre que l'intégrale sur le volume du réacteur du taux de croissance de biomasse local $r(y, C)$, qui lui dépend de la position y au sein du réacteur et de la concentration C . La géométrie du réacteur est très complexe : une cuve cylindrique traversée par 979 fibres optiques, perforées dans leur partie immergée et qui amènent la lumière depuis un concentrateur solaire et la dispersent dans le volume de réaction. Cette géométrie à elle seule justifie l'utilisation d'une méthode de Monte Carlo. Si $r(y, C)$ était connu en tout point, on écrirait

$$R(C) = \int_{\text{reacteur}} r(y, C) dy = \int_{\text{reacteur}} \frac{1}{V} dy r(y, C) V = \mathbb{E}_Y(r(Y, C)V) \quad (4.12)$$

où V est le volume de réaction et Y une variable aléatoire position distribuée uniformément dans le volume.

Cependant $r(y, C)$ n'est connu que comme une fonction non-linéaire f du taux d'absorption de photons local $a(y, C)$. C'est à ce stade qu'intervient la photosynthèse naturelle, qui est effectivement connue pour être une conversion non-linéaire de la quantité de photons absorbés par les algues. On retient

$$r(y, C) = f(a(y, C)) \quad (4.13)$$

Or le nombre de photons absorbés en y par unité de temps, $a(y, C)$, est lui même dépendant du transfert des photons depuis les fibres jusqu'à la position y . Grâce aux lectures statistiques usuelles de l'équation de transfert radiatif, on peut écrire cette absorption comme une moyenne sur l'ensemble des chemins optiques :

$$a(y, C) = \int_{\text{optique}} p_{\Gamma|y}(\gamma) d\gamma b(y, \gamma, C) = \mathbb{E}_{\Gamma|y}(b(y, \Gamma|y, C)) \quad (4.14)$$

où $\Gamma|y$ est une variable aléatoire traduisant les chemins optiques possibles, conduisant un photon depuis un point sur la fibre (une perforation) jusqu'à une absorption en y , et $b(y, \gamma, C)$ est la contribution d'un tel chemin γ . Cette contribution dépend de la concentration en biomasse C car le coefficient d'absorption du fluide (qui est une fonction de C) détermine la fraction du flux de lumière incidente qui est transmise le long du chemin optique γ (selon la loi de Beer).

En combinant les équations 4.12, 4.13 et 4.14, on obtient la grandeur recherchée (le taux de croissance global) à partir de deux espérances (la moyenne volumique et la moyenne sur les chemins optiques) combinées via la fonction f (la conversion photosynthétique) :

$$R(C) = \mathbb{E}_Y \left(f \left(\mathbb{E}_{\Gamma|Y}(b(Y, \Gamma|Y, C)V) \right) \right) \quad (4.15)$$

La question posée par J. Dauchet est donc la suivante : *Comment évaluer par une MMC la grandeur $R(C)$ qui est exprimée comme l'espérance d'une fonction non-linéaire d'une espérance ?*

La stratégie proposée par J. Dauchet consiste à projeter la fonction non-linéaire f sur une base polynomiale (par exemple via un développement en série entière), qu'il propose de reformuler en une série pondérée de monômes, dans le but d'échantillonner l'un d'entre

eux en employant n variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, tout en remarquant que $\mathbb{E}_X(X^n) = \prod_{i=1}^n \mathbb{E}_{X_i}(X_i)$ nécessite n échantillonnages indépendants de X . *La logique profonde de l'algorithme proposé est donc de transformer un processus non linéaire en un processus de dimension infinie linéaire équivalent, puis d'utiliser la capacité inhérente de Monte Carlo à gérer la dimension infinie.* Ainsi à condition que l'échantillonnage polynomial, qui est le prix à payer pour s'attaquer aux non-linéarités, reste "traitable", il devient alors possible de résoudre une multitude de problèmes non-linéaires comme ceux illustrés dans la Figure 4.2.

Dans chacune des quatre configurations décrites dans la Figure 4.2, la mise en œuvre algorithmique de la stratégie proposée par J. Dauchet est opérationnelle et a permis le calcul de grandeurs d'intérêt en géométrie complexe, sans aucune approximation, ce qui n'avait jamais été réalisé auparavant (même par le biais de méthodes déterministes). Dans le contexte du photobioréacteur¹, J. Dauchet a pu évaluer le taux de croissance de biomasse local $r(y, C)$ en tout point entre deux fibres. Il observe alors que les photons absorbés par les micro-organismes ne sont pas convertis linéairement au sein des unités photosynthétiques (voir Figure 4.2). Ce qui est remarquable dans ce premier résultat, c'est la capacité à produire cette estimation, sans aucune dégradation des modèles physique et chimique, ni même de la géométrie complexe composée de 979 fibres. Cependant, ce résultat a été produit indépendamment de la proposition de J. Dauchet, et n'est que la conséquence de la capacité inhérente de Monte Carlo à gérer une dimension infinie. Le deuxième résultat quant-à lui, n'aurait pu être réalisé sans sa proposition, qui lui a permis d'évaluer le taux de croissance de biomasse global $R(C)$, intégré sur tout le réacteur, en fonction de la concentration en micro-organismes (fonction non-linéaire du taux de croissance de biomasse local $r(y, C)$), lui permettant de déterminer la concentration optimale maximisant le taux de production de biomasse de l'ensemble de la cuve (voir Figure 4.2). Ce résultat est très intéressant pour la communauté du génie des procédés et peut être employé à des fins industrielles comme pour l'optimisation et le dimensionnement d'un réacteur.

Une autre force de sa proposition est la possibilité de combiner différentes physiques linéaires en les couplant les unes aux autres (chacune linéaire vue séparément, le problème devenant non-linéaire lorsqu'elles sont couplées). Rien ne limite en effet la méthode à un seul niveau d'emboîtement. Actuellement, les travaux menés par V. Gattepaille, toujours motivés par des préoccupations industrielles relevant du génie des procédés, ont pour objectif d'étendre l'algorithme proposé par J. Dauchet à la prise en compte des quatre physiques illustrées dans la Figure 4.2 au sein d'un seul et même algorithme de MC :

- partir du soleil et suivre le rayonnement à la traversée de l'atmosphère jusqu'à la centrale solaire (en pratique les chemins sont construits de façon réciproque, depuis la centrale vers le soleil),
- puis de la centrale solaire jusqu'au flux de lumière sortant de chaque fibre, via les réflexions sur chaque héliostat et la modélisation de la captation et du transport par les fibres,

1. le photobioréacteur est une cuve agitée continue, de 16.5 cm de diamètre, d'une hauteur de 1 m, éclairée intérieurement par 979 fibres optiques immergées dans la culture ; le diamètre de chaque fibre est de 1.2 mm, espacée de 4.8mm, le flux émis en surface de chaque fibre est homogène et égal à $\mathcal{F} = 25\mu\text{mol}/\text{kg}/\text{s}$. Le développement des micro-organismes à l'intérieur de la cuve est entièrement piloté par le taux d'absorption des photons, ces photons étant émis depuis la surface de chaque fibre à travers des perforations, diffusant dans le milieu suivant l'ETR, jusqu'à absorption par un micro-organisme.

- depuis la surface de chaque fibre suivre le rayonnement dans le milieu, diffusé ou absorbé par les micro-organismes,
- en évaluant les coefficients de diffusion et d'absorption des micro organismes via la résolution de l'électromagnétisme au sein de chaque micro organisme (tenant compte de sa forme et de sa composition, notamment pigmentaire),

et bien sûr en conservant la capacité initiale de cette modélisation statistique d'intégrer la non-linéarité de la conversion photosynthétique dans la géométrie d'une cuve industrielle. La complexité des problèmes de thermique que nous envisageons n'est pas liée, comme dans cet exemple, à l'emboîtement de physiques très diverses à des échelles très distinctes. En effet, même si des questions similaires se posent dans le contexte de la transition énergétique, notamment en ce qui concerne la modélisation thermique des villes, nous verrons que ce qui nous intéresse dans cette expérience pratique de plusieurs modélisations statistiques emboîtées non-linéairement est avant tout la perspective de procéder de même, au sein d'une seule physique, mais de façon récursive.

Nous proposons de résumer les fondements de la technique de J. Dauchet et al. à travers l'étude de la grandeur $A = \mathbb{E}_Y \left(f \left(\mathbb{E}_{X|Y} (X|Y) \right) \right)$ que l'on écrit,

$$A = \int_{D_Y} p_Y(y) dy f \left(\int_{D_{X|Y}} p_{X|Y}(x|y) dx \right) \quad (4.16)$$

où p_Y et $p_{X|Y}$ sont les densités de probabilité des v.a. Y et $X|Y$ respectivement et f une fonction non-linéaire². Le développement en série entière de f autour d'un point de référence noté $x_{ref} \in \mathbb{R}$ (ou une projection sur une base polynomiale), nous permet d'écrire f comme une série pondérée,

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n \in \mathbb{N}} a_n (x - x_{ref})^n \\ &= \sum_{n \in \mathbb{N}} p_n \left(\frac{a_n}{p_n} (x - x_{ref})^n \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

où $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de nombres réels strictement positifs tels que $\sum_{n \in \mathbb{N}} p_n = 1$, choisie arbitrairement. La grandeur A s'écrit,

$$\begin{aligned} A &= \int_{D_Y} p_Y(y) dy \sum_{n \in \mathbb{N}} p_n \left(\frac{a_n}{p_n} \left(\int_{D_{X|Y}} p_{X|Y}(x|y) dx (x - x_{ref})^n \right) \right) \\ &= \int_{D_Y} p_Y(y) dy \sum_{n \in \mathbb{N}} p_n \prod_{i=1}^n \int_{D_{X|Y}} p_{X_i|Y}(x_i|y) dx_i \left(\frac{a_n}{p_n} (x_i - x_{ref}) \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

que l'on exprime comme une seule espérance,

$$A = \mathbb{E}_{\mathcal{A}} (\mathcal{A}) \quad (4.19)$$

avec

$$\mathcal{A} = \frac{a_N}{p_N} P_N(\vec{X}_N|Y) \quad (4.20)$$

où N est une variable aléatoire prenant la valeur $n \in \mathbb{N}$ avec la probabilité p_n , et $P_N(\vec{X}_N|Y) = \prod_{i=1}^N (X_i|Y - x_{ref})$ avec $\vec{X}_N|Y = (X_1|Y, X_2|Y, \dots, X_N|Y)$ et $X_i|Y$ sont des v.a. indépendantes

2. Par rapport à l'exemple du photobioréacteur que nous venons de détailler, nous avons seulement simplifié les notations en remplaçant $b(Y, \Gamma|Y, C)V$ par $X|Y$

et identiquement distribuées par rapport à $X|Y$. En utilisant le principe de double randomisation (sec. 5.17), l'algorithme de MC associé à l'Eq. (4.19) est décrit par l'Algorithme 14.

Algorithme 14 : Fonction $F(t)$ d'échantillonnage de \mathcal{A} au temps t . Le poids de Monte-Carlo est $w = F(t)$.

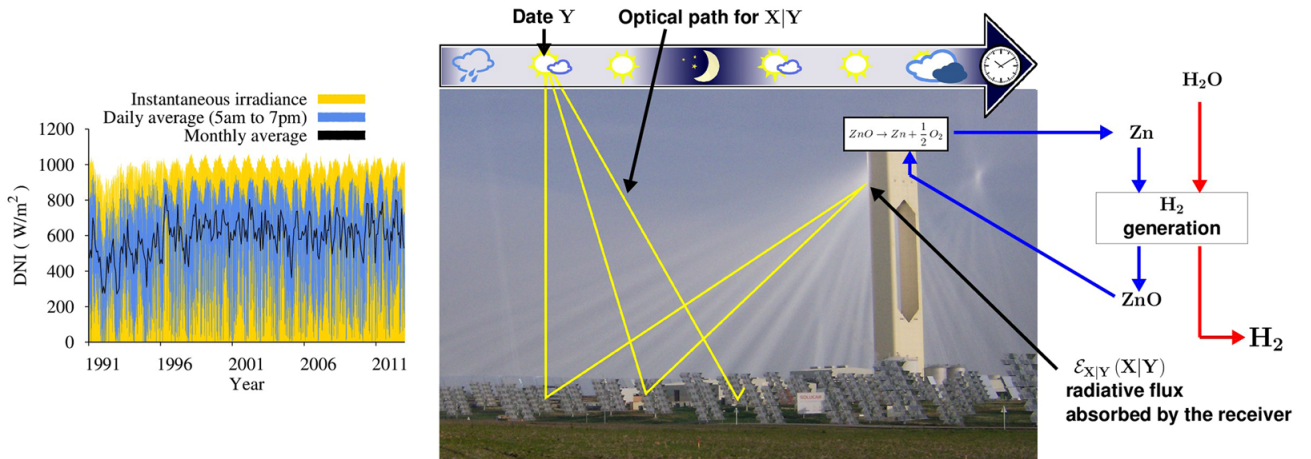
```

1  $w = 1$ ;
2 Échantillonner  $y$  suivant  $Y$ ;
3 Échantillonner  $n$  suivant  $N$ ;
4 foreach  $i$  in  $1 : n$  do
5   | Échantillonner  $x_i$  suivant  $X_i|(Y = y)$ ;
6   |  $w = w(x_i - x_{ref})$ ;
7  $w = \frac{a_n}{p_n} w$ ;
```

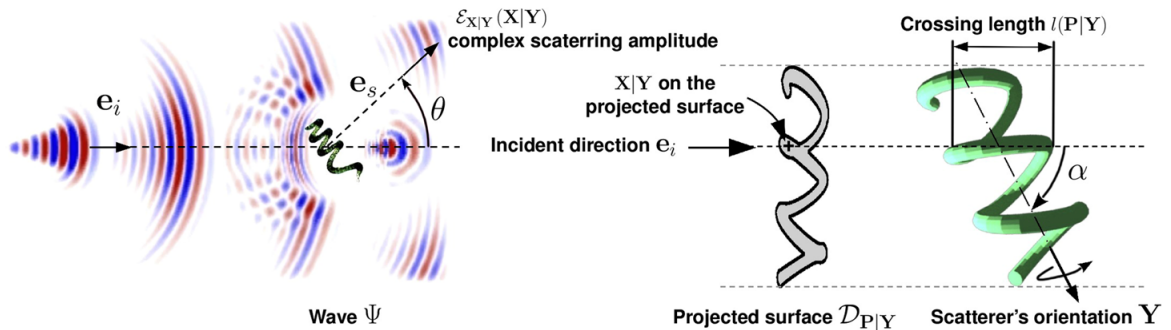
Le nombre n était typiquement de l'ordre de 40 dans l'exemple du photobioréacteur. Le choix de N est essentiel. On fait ce choix en fonction des propriétés non-linéaires de f . Par exemple si l'on considère un problème où les trois premiers termes de la série sont une bonne approximation de f , et que le résidu dû aux termes supérieurs est négligeable par rapport aux trois premiers, alors nous choisirons la suite $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ telle que la somme $p_0 + p_1 + p_2$ soit proche de 1 i.e. de telle sorte que la variable aléatoire N ne prenne que rarement des valeurs plus grandes que 2.

Nous aborderons dans la prochaine section une classe de problèmes non-linéaires dont la non-linéarité se traduit par la dépendance du coefficient d'extinction à la grandeur physique, les ACN permettant de reporter la non-linéarité dans la probabilité p , qui devient le lieu de la dépendance à la solution du problème. Cette probabilité p pourra être remplacée par sa série entière et se traduira par l'échantillonnage d'un monôme de degré n , à l'origine de n branches.

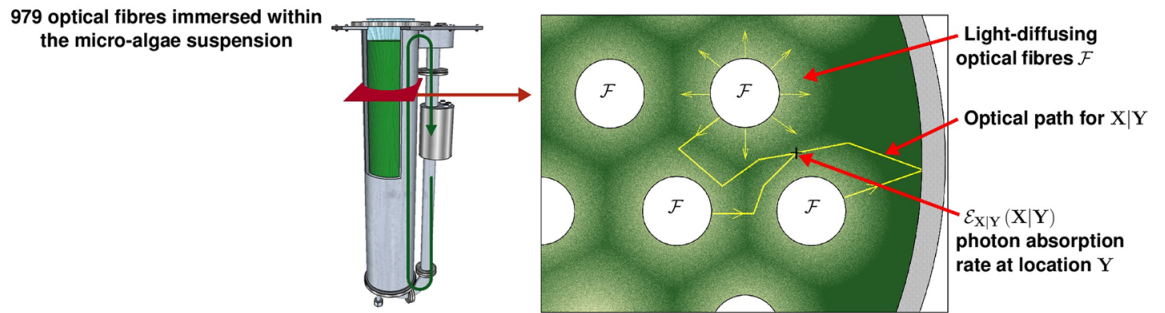
a Solar Plant: $C(\mathbf{p}) = \mathcal{E}_Y \left(\exp \left(C_4 (\mathcal{E}_{X|Y}(X|Y))^{-\alpha} \right) \sum_{m=0}^3 C_m (\mathcal{E}_{X|Y}(X|Y))^{(m\alpha-1)} \right)$



b Wave scattering: $S(e_s) = \mathcal{E}_Y \left(|\mathcal{E}_{X|Y}(X|Y)|^2 \right)$



c Biomass production: $R(C) = \mathcal{E}_Y \left(C \left(\alpha \frac{K \mathcal{E}_{X|Y}(X|Y)}{K + \mathcal{E}_{X|Y}(X|Y)} - \beta \frac{K_r}{K_r + \mathcal{E}_{X|Y}(X|Y)} \right) \right)$



d Atmospheric radiative transfert: $I(\Delta\nu) = \mathcal{E}_Y (S_Y \exp(-\mathcal{E}_{X|Y}(X|Y)))$

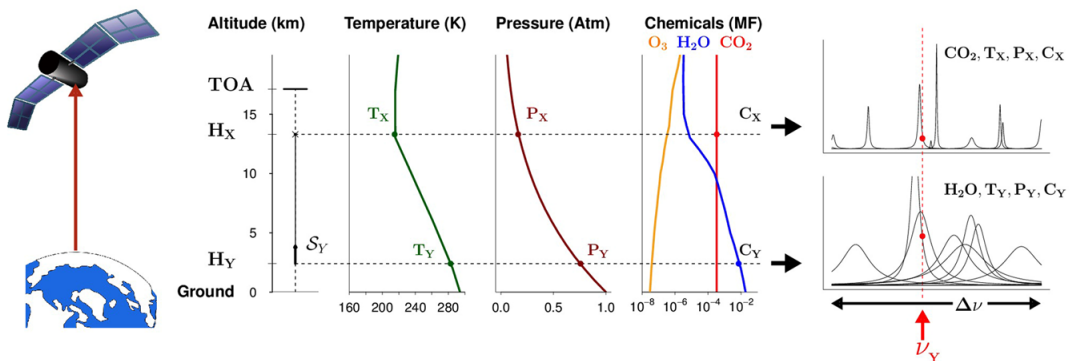


FIGURE 4.2 – Quatre exemples de systèmes complexes non-linéaires (source [13])

FIGURE 4.1 – Quatre exemples de systèmes complexes non-linéaires (source [13]) : La Fig.(1a) représente l'intégration des fluctuations horaires de l'apport solaire sur 30 ans dans la géométrie complète d'un champ d'héliostats d'un kilomètre de large afin d'optimiser le taux de conversion chimique sur la durée de vie de la centrale. Les photons émis par le soleil sont réfléchis sur les héliostats et concentrés à l'entrée du réacteur chimique. En fonction de leur succès de transmission X , la puissance solaire $\mathbb{E}X|Y(X|Y)$ absorbée par le récepteur à un instant aléatoire Y détermine le taux de conversion chimique non linéaire de la réaction $Z_nO \mapsto Z_n + 1/2O$. Dans la Fig. 1b, est représenté la diffusion d'une onde plane incidente de direction e_i diffusée par une cyanobactérie hélicoïdale dont l'indice de réfraction est beaucoup plus grand que la longueur d'onde (particule optiquement molle). L'amplitude de diffusion complexe $\mathbb{E}_{X|Y}(X|Y)$ est la somme des contributions des ondes secondaires $X|Y$ (interférences) provenant de la surface du diffuseur dont l'orientation est aléatoirement distribuée suivant Y . L'estimation de la section efficace différentielle à diffusion unique $S(e_s)$, dans la direction e_s pour une suspension de particules, en supposant une diffusion indépendante, est évaluée en faisant la moyenne du module au carré de $\mathbb{E}_{X|Y}(X|Y)$ sur les statistiques des orientations Y . La Fig. (1c) illustre la production de phytoplancton dans un photobioréacteur à cuve agitée continue, éclairé intérieurement par 979 fibres optiques \mathcal{F} immergées dans la culture. Le taux local d'absorption des photons $\mathbb{E}_{X|Y}(X|Y)$ à l'emplacement Y est la moyenne des contributions $X|Y$ de chaque chemin optique des fibres à Y à travers la suspension de diffusion et d'absorption. L'estimation du taux de croissance global $R(C)$ dans l'ensemble du volume de culture, en fonction de la concentration de biomasse C , est évaluée en faisant la moyenne du taux local d'absorption sur les emplacements du volume. Enfin, dans la Fig. (1d) est illustré le transfert radiatif atmosphérique : intensité spécifique du haut de l'atmosphère (TOA) (de la Terre vers l'espace). Les photons émis par l'atmosphère aux fréquences infrarouges sont dus à des transitions d'émission aléatoires Y , d'un état énergétique supérieur à un état énergétique inférieur, principalement des molécules de CO_2 et H_2O de concentration C_Y à l'altitude H_Y . La source correspondante \mathcal{S}_Y dépend de l'état thermodynamique de l'atmosphère, principalement de la température T_Y (définissant la population de l'état énergétique) et de la pression P_Y . Cette source est ensuite exponentiellement atténuée par l'absorption atmosphérique, c'est-à-dire par toutes les transitions d'absorption aléatoires $X|Y$, d'un état d'énergie inférieur à un état d'énergie supérieur, se produisant à l'altitude $H_{X|Y}$ entre H_Y et le haut de l'atmosphère.

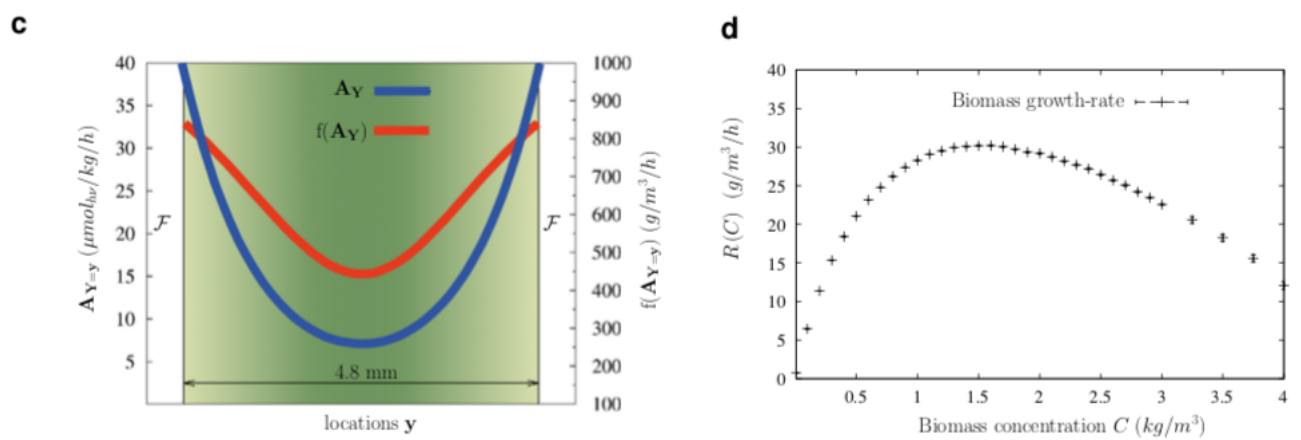


FIGURE 4.2 – Dans la figure (c), les photons absorbés par une cellule phytoplanctonique sont convertis de façon non linéaire au sein des unités photosynthétiques, conduisant à un profil spatial bien particulier du taux de croissance de la biomasse $f(a(Y, C))$. Dans la figure (d), le taux de croissance du réservoir plein dépend de la concentration de biomasse et indique la concentration optimale permettant le plus grand taux de production de biomasse (source [13]).

4.1.3 Résolution d'une équation de Boltzmann non-linéaire

Pour illustrer le concept qui nous intéresse dans la proposition établie par G. Terrée et al. [20], nous retenons son traitement d'un exemple émanant d'une EDP non linéaire en physique statistique, l'équation de Boltzmann, qui régit la densité spatio-temporelle des particules en interaction dans un gaz dilué. Pour simplifier cette étude, nous considérons un cas académique décrit par une version simplifiée de l'équation de Boltzmann (4.21). Il s'agit de représenter la cinétique d'un gaz mono-moléculaire et mono-atomique, dans une situation uniforme et isotrope : $f(\vec{x}, \vec{c}, t) = f(\|\vec{c}\|, t)$, où f est la fonction de distribution des particules dans le gaz. Par commodité, on notera toutefois $f(\vec{x}, \vec{c}, t) = f(\vec{c}, t)$. Dans ces conditions, les termes de transport de l'équation de Boltzmann sont nuls. Ne restent que les termes collisionnels, la physique correspondante étant facile à visualiser : une particule de vitesse \vec{c} suit simplement son vol "balistique" jusqu'à ce qu'elle entre en collision avec une autre particule de vitesse \vec{c}_* ; à l'issue de cette collision instantanée, la vitesse de la particule passe de la vitesse \vec{c} à la vitesse \vec{c}' . L'équation de la variation de la densité des particules dans l'espace des phases (position, vitesse) est non linéaire car le taux de collision (coefficient d'extinction) dépend de la densité elle-même.

$$\partial_t f(\vec{c}, t) = - \int_C dc_* \int_{4\pi} du' (f(\vec{c}_*, t) f(\vec{c}, t) - f(\vec{c}', t) f(\vec{c}_*, t)) \quad (4.21)$$

où

$$\begin{cases} \vec{c}' = \frac{\vec{c} + \vec{c}_*}{2} + \frac{\|\vec{c} - \vec{c}_*\|}{2} \vec{u}' \\ \vec{c}_*' = \frac{\vec{c} + \vec{c}_*}{2} - \frac{\|\vec{c} - \vec{c}_*\|}{2} \vec{u}' \end{cases} \quad (4.22)$$

où C est l'espace des vitesses possibles, la condition initiale étant donnée à l'instant t_I . La question posée par G. Terrée est alors la suivante : *Comment résoudre par Monte-Carlo l'équation de Boltzmann (4.21)-(4.22) sans faire appel à une approche en essaim ?*

Pour répondre à cette question, G. Terrée commence par introduire deux densités de probabilité pour gérer les deux intégrales, une pour l'espace des vitesses et une pour l'espace des directions, ceci dans le but de faire apparaître les différentes lois de tirage, puis il propose une stratégie élégante qui part de l'idée des collisions nulles et d'une technique d'échantillonnage des probabilités de rejet résultantes, qui sont ici inconnues :

- Premièrement, il observe que le coefficient d'extinction est hétérogène du fait qu'il dépend de la densité f , le taux de collision étant proportionnel à la densité de particules. Cette hétérogénéité aussi complexe soit-elle peut être prise en compte via la technique des algorithmes à collision nulle à condition de déterminer un majorant du coefficient d'extinction qui sera construit en fonction des conditions aux limites imposées sur f . En revanche, et contrairement au cas linéaire présenté section 5.17, la probabilité issue de l'ACN, permettant d'identifier la nature de la collision, est une fonction de la densité, i.e. $p \equiv p(f)$. Physiquement, cela signifie que la probabilité que la collision échantillonnée soit une vraie collision dépend de la densité, ce qui est naturel au vu de la physique que nous étudions (" f collisionne avec f ").
- Pour gérer le fait que la probabilité $p(f)$ est inconnue, G. Terrée s'est appuyé sur le fait que p est linéaire : " f collisionne avec f " mais ne collisionne pas suivant un coefficient d'extinction fonction non linéaire de f . Dans cette vision statistique, l'équation de Boltzmann est donc un cas très particulier qui a permis de premières expérimentations dans le contexte de Monte Carlo non linéaire.

G. Terrée a ainsi pu remplacer $p(f)$ par $p(\mathbb{E}(F)) = \mathbb{E}(p(F))$ où F est une v.a. d'espérance f (à déterminer), puis employer la technique proposée par J. Dauchet que nous avons résumée à la section précédente, via l'emploi de deux v.a. F_1 et F_2 indépendantes et identiquement distribuées à F . Si f_1 est une réalisation de F_1 , alors $p(f_1)$ est à valeurs dans $[0, 1]$ (par construction dans son cas puisque f_1 intervient à l'intérieur de l'expression de la probabilité), et il l'utilise comme une probabilité pour l'échantillonnage du type de collision.

Finalement, la méthode des ACN a permis de gérer l'hétérogénéité du coefficient d'extinction en reportant la non-linéarité dans la probabilité $p(f)$ dont le rôle est d'identifier la nature de la collision : vraie ou virtuelle. Cette probabilité devient donc indéterminée. A défaut de connaître la valeur de f et donc de $p(f)$, G. Terrée propose de remplacer p par la réalisation d'une variable aléatoire d'espérance $p(f)$ dont les réalisations sont comprises dans $[0, 1]$. Il choisit naturellement $p(f_1)$ où f_1 est obtenu récursivement par un appel au même algorithme visant à évaluer f : l'algorithme est "branchant".

La probabilité que la collision échantillonnée soit une vraie collision est donc une fonction de f_1 , cette dépendance étant interprétée de la façon suivante : plus la valeur de f_1 sera élevée (proche du majorant \hat{f}) et plus la probabilité que la collision échantillonnée soit une vraie collision le sera également. Au contraire, plus la valeur de f_1 sera faible et plus la collision échantillonnée aura de chance d'être une collision virtuelle, ce comportement algorithmique étant en parfaite adéquation avec la physique étudiée : le coefficient d'extinction est d'autant plus élevé que la densité l'est, car les particules collisionnent entre elles. Mais par comparaison avec les algorithmes à collision nulle en transport linéaire, l'objectif idéal d'avoir le moins possible de collisions nulles n'est pas la seule contrainte lorsque l'on cherche à minimiser les coûts calculatoires : même lors des collisions réelles, de nouvelles branches sont initiées et l'algorithme s'effondre, du fait de sa récursivité, pour tous les problèmes à faible nombre de Knudsen (i.e. beaucoup de collisions à représenter entre le point étudié et une condition à la limite connue, ou entre l'instant étudié et la condition initiale).

G. Terrée n'a donc pu aborder pratiquement que des problèmes à grand Knudsen (des fluides très raréfiés). Mais sa proposition est très significative dans ce contexte applicatif déjà large (voir la Figure 4.6) car sa technique d'estimation ne nécessite pas la résolution exhaustive de tout le champ aux instants précédents : comme dans les algorithmes MC reverse standard pour résoudre le transport linéaire, les informations sur les états antérieurs du champ sont reconstruites le long de chaque chemin uniquement "là" et "quand" elles sont nécessaires (ici à chaque collision lorsque l'on remonte la trajectoire). Le contraste avec MC linéaire est que la non-linéarité due aux collisions se traduit par des chemins branchants, le branchement étant la conséquence de la dépendance à f de la probabilité p : la probabilité $p = f/\hat{f} = \mathbb{E}_{F_1}(F_1/\hat{f})$ nécessite l'échantillonnage récursif d'une réalisation de F_1 ce qui se traduit par l'apparition d'une branche à chaque collision. Les retombées applicatives de cette proposition sont significatives pour la communauté de la chimie nucléaire. Les résultats présentés dans la Figure 4.5 illustrent deux bénéfices importants de cet algorithme de résolution, tous deux liés à la capacité à concentrer l'étude sur une partie spécifique de l'espace des phases (espace géométrique, espace des vitesses). Cette capacité est tout à fait usuelle en transport linéaire, e.g. suivre les photons responsables d'une image, depuis la caméra vers le soleil, et non pas décrire tout le champ de rayonnement. Mais elle est une rupture dans le transport non-linéaire :

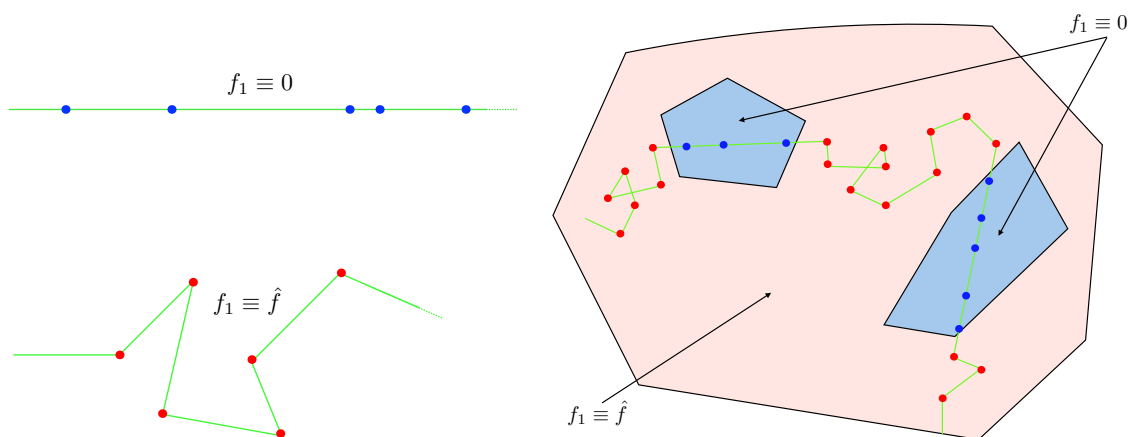


FIGURE 4.3 – Représentation de la trajectoire d’une particule dans un milieu hétérogène (champ de particules f hétérogène), composé de deux types de zone, des zones Z_0 où la densité de particules est nulle et des zones $Z_{\hat{f}}$ où la densité de particules est uniforme égale à \hat{f} . Dans les zones Z_0 , les particules ne subissent aucune diffusion, elles se déplacent balistiquement. Dans les zones $Z_{\hat{f}}$, les particules collisionnent suivant une loi exponentielle de paramètre \hat{f} . La difficulté liée à l’échantillonnage de cette trajectoire est que nous ne connaissons pas le champ de particules f (qui est l’observable que l’on cherche à évaluer) et donc les zones Z_0 et $Z_{\hat{f}}$ à l’avance.

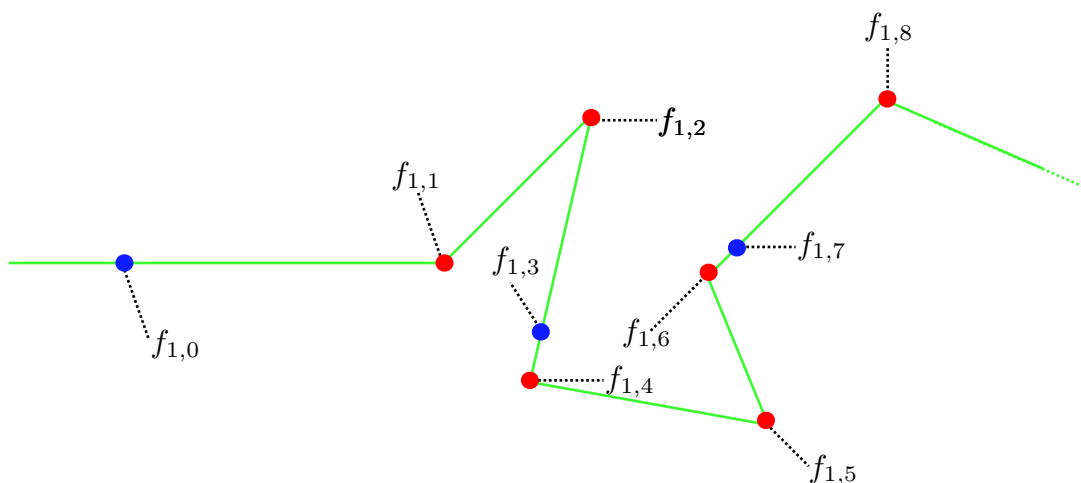


FIGURE 4.4 – Représentation d’une trajectoire réalisée par une particule, durant laquelle a eu lieu huit collisions en $(\vec{x}_i)_{i \in \{1,2,\dots,8\}}$, à l’origine de huit branches $(f_i)_{i \in \{1,2,\dots,8\}}$, qui elles-mêmes seront à l’origine de nouvelles branches qui ne sont pas représentées ici.

- Le premier résultat présenté dans la Figure 4.5, est un cas académique pour lequel des solutions analytiques ont été publiées. Il s’agit de l’analyse faite par Krook de la dynamique de relaxation d’une distribution de vitesses initialement très éloignée de l’équilibre. L’analyse de Krook a permis de fournir une solution analytique à un problème qui semblait impossible à résoudre numériquement pour les méthodes en essaim : les événements ayant les plus grandes conséquences, à savoir les collisions impliquant des particules à haute énergie (ici des particules à grande vitesse), qui se

trouvent loin dans la queue de la distribution des vitesses, ont une très faible probabilité d'occurrence (événements rares). Et ce sont pourtant ceux qui expliquent la cinétique nucléaire dans cette condition. En utilisant la proposition de G. Terrée, les fractions de particules ayant un module de vitesse aussi élevé que 6 fois la valeur moyenne, qui correspondent à une fraction inférieure à 10^{-11} du nombre total de particules, peuvent maintenant être quantifiées numériquement aussi précisément que souhaité (voir Figure 4.5), ce qui permet de s'écarter des conditions académiques de l'étude de Krook. Avec ce travail, G. Terrée montre donc qu'il est possible de construire utilement un espace de chemins branchés qui partent d'un point très particulier de l'espace des vitesses et qui ne vont couvrir le reste de cet espace que dans la mesure de l'information nécessaire à la dynamique d'un ensemble bien précis de particules. Comme dans l'exemple de l'image ci-dessus, il n'est pas nécessaire de décrire explicitement toute la distribution.

- Le deuxième résultat conduit à une conclusion identique, mais dans l'espace géométrique (et non plus dans l'espace des vitesses). Le gaz étudié est maintenant confiné par des parois solides. G. Terrée a considéré deux géométries, un tube tortueux (Fig. 4.6b) et un tube court avec une gorge (Fig. 4.6a). Il montre d'abord que ses algorithmes conservent la propriété connue en rayonnement de permettre une mise en œuvre efficace en géométrie complexe grâce aux outils de la synthèse d'images. Mais avec l'exemple de la gorge, il montre surtout qu'il est possible de faire partir les chemins depuis la gorge pour étudier l'écoulement en son sein, c'est à dire depuis une toute petite partie du système, sans avoir besoin de suivre un grand ensemble de marcheurs couvrant l'ensemble du domaine, comme dans les approches en essaim.

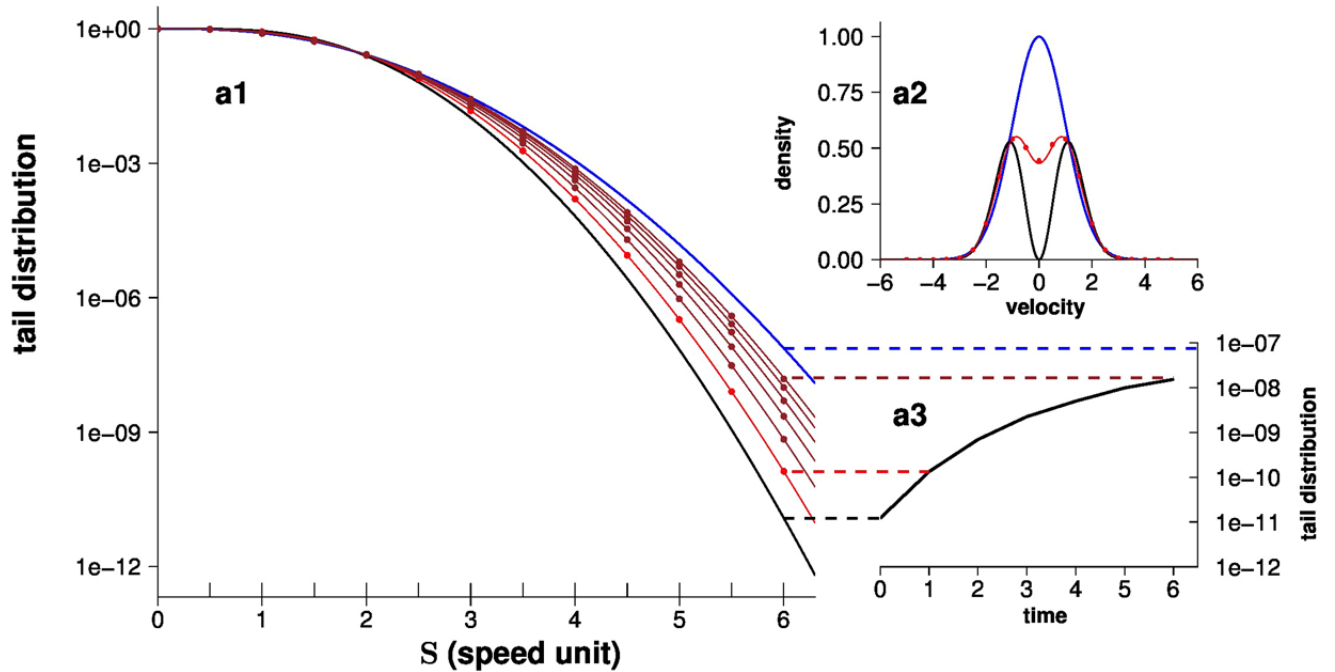
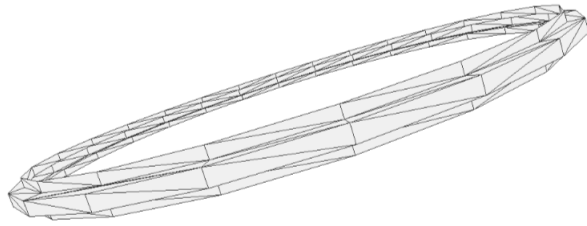
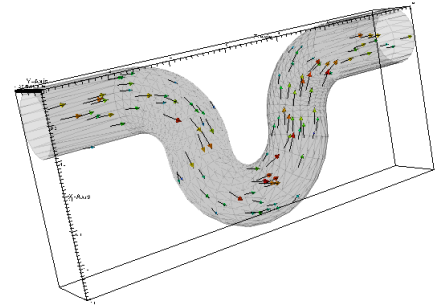


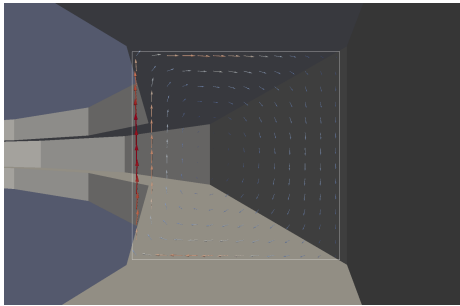
FIGURE 4.5 – Relaxation de la distribution de vitesse à l'équilibre, source [20, 13] ((a1) distribution de queue des vitesses des particules (fraction de particules plus rapides que S), (a2) fonction de densité de probabilité de la vitesse, (a3) variation de la fraction de particules six fois plus rapides que la vitesse unité). Dans un gaz homogène, les collisions entre particules redistribuent les vitesses de sorte que la distribution des vitesses tend à s'équilibrer (distribution maxwellienne). En partant d'une distribution loin de l'équilibre (courbes noires), est évaluée la relaxation d'une distribution maxwellienne (courbes bleues) en estimant la distribution de la queue à différents moments (par exemple, les courbes rouges correspondent à l'état du système à 1 unité de temps). Les lignes continues correspondent aux solutions analytiques et chaque point correspond à une estimation MCNL indépendante. La fraction de particules qui ont une vitesse six fois plus rapide que la vitesses unité (a3) illustre comment MCNL explique l'augmentation de 1000 fois dans les particules à grande vitesse les plus rares, sans discrétisation d'espace ou de temps. Fait remarquable, les évènements rares sont estimés avec la même précision que les évènements fréquents (104 échantillons pour chaque estimation, les intervalles de confiance de toutes les estimations sont contenus dans l'épaisseur de la pointe).



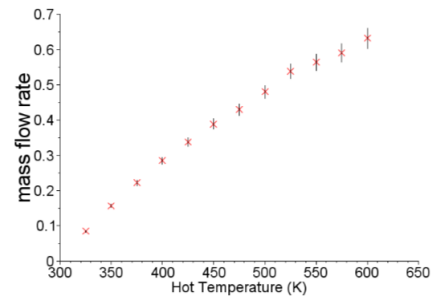
(a) Tube court avec une gorge



(b) Tube tortueux



(c) Champ de densité de débit dans une gorge du tube court, obtenu par une série de calculs sondes sur les points d'une grille. Dans les calculs ayant donné ces résultats, il n'y a pas de collisions



(d) Profil du débit de matière dans le tube tortueux, en fonction de la température de l'un des réservoirs, l'autre étant supposé à $300K$

FIGURE 4.6 – Dans les deux géométries, on se place en régime permanent. Le tube relie deux réservoirs. De chaque réservoir sort une distribution de particules à l'équilibre, avec une densité et une température fixes, et une vitesse moyenne nulle. Les deux réservoirs sont à pressions égales, mais à deux températures différentes. Hors des connexions avec les réservoirs, les parois réfléchissent les particules en les thermalisant : la distribution des particules quittant les parois est maxwellienne en tout point, à vitesse nulle et température de la paroi, avec une densité réglée de sorte qu'aucun flux de matière ne traverse la paroi. La température des parois suit un profil affine selon la coordonnée z , continu avec les températures des réservoirs, les connexions aux réservoirs suivent des plans d'équation $z = cste$ (source [20, 13]).

Nous proposons de résumer les fondements de la technique de G. Terrée et al. à travers l'étude théorique de la grandeur A solution de l'équation (4.23), dont l'objectif est d'exprimer A comme une espérance.

$$A = p_I A_I + (1 - p_I) (p(A)A + (1 - p(A)) S) \quad (4.23)$$

où A_I une constante, p_I une probabilité, S une source constante et p une fonction linéaire à valeurs dans $[0, 1]$. Faisons l'hypothèse que cette variable aléatoire existe et notons la X . Par conséquent $A = \mathbb{E}_X(X)$ et nous pouvons écrire,

$$\mathbb{E}_X(X) = p_I A_I + (1 - p_I) (p(\mathbb{E}_X(X))\mathbb{E}_X(X) + (1 - p(\mathbb{E}_X(X))) S) \quad (4.24)$$

Avant de tirer des conclusions trop hâtives, rappelons que l'algorithme qui consisterait à retenir avec la probabilité p_I la valeur de A_I , avec la probabilité $(1 - p_I)p(x)$ la valeur de x (échantillonnée suivant X) et avec la probabilité $(1 - p_I)(1 - p(x))$ la valeur de S comme poids de MC, est biaisé du fait que $\mathbb{E}_X(p(X))\mathbb{E}_X(X) \neq \mathbb{E}_X(p(X)X)$ (voir section 4.1.2). Ainsi la variable aléatoire \tilde{X} définie telle que

$$\tilde{X} = \mathcal{B}(p_I)A_I + (1 - \mathcal{B}(p_I)) (\mathcal{B}(p(\tilde{X}))\tilde{X} + (1 - \mathcal{B}(p(\tilde{X}))) S) \quad (4.25)$$

n'est pas un candidat acceptable puisque $\mathbb{E}_{\tilde{X}}(\tilde{X}) \neq A$ (si $p_I < 1$, dans le cas où $p_I = 1$ le problème est trivialement résolu). Pour contourner cette difficulté, nous introduisons deux variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées X_1 et X_2 par rapport à X , afin d'écrire,

$$A = p_I A_I + (1 - p_I) (p(\mathbb{E}_{X_1}(X_1))\mathbb{E}_{X_2}(X_2) + (1 - p(\mathbb{E}_{X_1}(X_1))) S) \quad (4.26)$$

la linéarité de l'espérance nous permettant de factoriser les espérances \mathbb{E}_{X_1} et \mathbb{E}_{X_2} : $A = \mathbb{E}_{X_1, X_2} (p_I A_I + (1 - p_I) (p(X_1)X_2 + (1 - p(X_1)) S))$. Il devient donc naturel de considérer les réalisations $p(x_1)$ de $p(X_1)$ comme des probabilités, de les transformer en un test de Bernouilli et enfin de réécrire A sous une formulation intégrale,

$$A = p_I A_I + (1 - p_I) \int_{\mathcal{D}_{X_1}} p_{X_1}(x_1) dx_1 \left(\begin{array}{l} p(x_1) \int_{\mathcal{D}_{X_2}} p_{X_2}(x_2) dx_2 x_2 \\ + (1 - p(x_1)) S \end{array} \right) \quad (4.27)$$

puis comme une seule espérance,

$$A = \mathbb{E}_X(X) \quad (4.28)$$

avec

$$X = \mathcal{B}(p_I)A_I + (1 - \mathcal{B}(p_I)) (\mathcal{B}(p(X_1))X_2 + (1 - \mathcal{B}(p(X_1))) S) \quad (4.29)$$

où $\mathcal{B}(P)$ est une variable aléatoire de Bernouilli de paramètre aléatoire P : l'échantillonnage d'une réalisation b_p de $\mathcal{B}(P)$ consiste à échantillonner une réalisation $p \in [0, 1]$ de P puis à échantillonner une réalisation b_p suivant une loi de Bernouilli de paramètre p .

L'algorithme d'échantillonnage de X est décrit dans l'algorithme 15. Cet algorithme consiste soit à retenir avec la probabilité p_I la valeur de A_I , soit avec la probabilité $1 - p_I$ à échantillonner une réalisation x_1 suivant X_1 pour déterminer une valeur de la probabilité $p(x_1)$, cet échantillonnage étant à l'origine de la génération d'une branche. Une fois que la contribution x_1 associée à cette branche est évaluée (aussi compliquée soit-elle), on échantillonne x_2 suivant X_2 avec la probabilité $p(x_1)$ et on retient x_2 comme poids de MC, sinon avec la probabilité $1 - p(x_1)$ on retient S comme poids MC.

Algorithme 15 : Fonction $F(\cdot)$ d'échantillonnage récursif de X . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = A_I$ ou $w = S$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F .

```

1 Échantillonner  $r$  suivant  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
2 if  $r < p_I$  then
3   |  $w = A_I$ ;
4 else
5   |  $x_1 = F(\cdot)$  (génération d'une branche);
6   | Échantillonner  $r$  suivant  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
7   | if  $r < p(x_1)$  then
8     |  $w = F(\cdot)$ ;
9   | else
10  |  $w = S$ ;

```

La variable aléatoire X définie par l'équation (4.29) semble être un candidat parfait comme réponse à notre question. Cependant, il peut arriver sous certaines conditions que cet échantillonnage soit impraticable, pour la simple et bonne raison que cet algorithme est branchant : chaque échantillonnage de X retourne soit la valeur de A_I avec la probabilité p_I , soit génère une branche avec la probabilité $1 - p_I$ (échantillonnage de X_1). Par conséquent, si la probabilité p_I est nulle, alors automatiquement l'échantillonnage de X nécessite la génération d'une branche qui à son tour en nécessitera une autre et ainsi de suite, le nombre de branches moyen générées étant infini³. Dans ce cas ($p_I = 0$), l'Algorithme 15 devient impraticable et l'échantillonnage de X n'est plus possible. Cette propriété intrinsèque à cette variable aléatoire a été complètement théorisée par I. Dimov [8, 9]. Finalement, cette condition signifie pour nous que l'échantillonnage devient réalisable à condition que le nombre moyen de branches générées lors d'une réalisation soit strictement inférieur à un.

Il est intéressant de remarquer lors de l'étude réalisée par G. Terrée Eq.(4.21)-(4.22), que le problème soulevé par I. Dimov ne peut pas avoir lieu car chaque échantillonnage de la v.a. est suivie d'un saut temporel (échantillonné suivant une exponentielle) de sorte que les branches générées se rapprochent inconditionnellement de la condition initiale. La condition initiale peut ainsi être vue comme une frontière au delà de laquelle il n'y a plus aucun branchement ! Bien sûr, plus la condition initiale est éloignée du temps d'observation, et plus le nombre de branches générées sera grand (mais ce nombre restera fini !).

Nous verrons lors de l'étude des différents transferts thermiques non-linéaires qu'il est possible de reformuler le modèle, quitte à enlever la spatialisation (qui est complètement décorrélée de la non-linéarité), en une unique équation différentielle ordinaire d'ordre un, non-linéaire, cette non-linéarité étant entièrement pilotée par un coefficient d'extinction qui dépendra de la température et qui pourra être pris en compte via la technique présentée ci dessus, établie par G. Terrée.

Avant d'attaquer l'étude des différents transferts thermiques non-linéaires, nous proposons une combinaison de ces trois algorithmes de MC Non-Linéaires que nous présentons sous forme d'une synthèse, ceci dans le but de fixer une stratégie de résolution systématique.

3. Nous verrons que ce sera le cas lors de l'étude des transferts thermiques par rayonnement σT^4 et convection $h(T)$

4.1.4 Synthèse : une combinaison des trois propositions

Nous proposons ici une combinaison de ces trois algorithmes de MC Non-Linéaire. Même si elle est très académique, on retrouvera cette synthèse au cœur de l'étude des différentes non-linéarités en transfert thermique, chacune d'entre elles pouvant être vue (après reformulation et sans spatialisation) comme similaire à l'équation (4.30). Nous allons donc construire un algorithme de Monte-Carlo associé à y solution de l'équation différentielle d'ordre 1 non-linéaire suivante,

$$\begin{cases} y'(t) = -k(y(t)) (y(t) - S(t)) \\ y(t_I) = y_I \end{cases} \quad (4.30)$$

où k est une fonction non-linéaire, cet algorithme étant élaboré à partir des trois étapes suivantes :

1. **[Prise en compte de la variation temporelle (l'hétérogénéité) du coefficient d'extinction k]** La première étape consiste à remarquer que le coefficient d'extinction k est dépendant du temps car dépendant de la grandeur y . Pour gérer cette dépendance sans approximation, nous employons la méthode des ACN comme expliqué dans la section 4.1.1 (la seule différence étant la dépendance de k à t via y , ce qui ne change en rien la démarche jusqu'ici), afin d'exprimer y sous une forme intégrale,

$$y(t) = \int_0^{+\infty} \hat{k} \exp(-\hat{k}s) ds \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t-s) y_I \\ + \mathcal{H}(t_I < t-s) \left(\begin{array}{l} p(y(t-s)) S(t-s) \\ + (1-p(y(t-s))) y(t-s) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (4.31)$$

où \hat{k} est un majorant de k et la probabilité $p(y) = k(y)/\hat{k}$. La non-linéarité, qui au départ empêchait l'échantillonnage de la position de collision s , a été reportée, via ACN, dans la probabilité $p(y)$ qui n'est pas connue, nous empêchant donc de déterminer la nature de la collision : vraie ou virtuelle.

2. **[Extension à des profils de k non-linéaires]** L'idée est alors de remplacer cette probabilité par une réalisation d'une variable aléatoire d'espérance $p(y)$ qui reste à définir. Pour cela on suppose qu'existe une variable aléatoire Y d'espérance y (i.e. que le problème que nous cherchons à résoudre est déjà résolu) tout en rappelant que la v.a. $p(Y) = k(Y)/\hat{k}$ n'est pas un candidat acceptable, la moyenne arithmétique des réalisations de $p(Y)$ étant biaisée du fait de la non-linéarité de p . Pour remédier à cette difficulté, on utilise un développement en série entière de p autour d'un point de référence y_{ref} , puis on exprime cette série entière comme une série pondérée, chaque monôme étant remplacé par un produit de v.a. indépendantes et identiquement distribuées par rapport à Y dans le but d'écrire $p(y)$ comme une espérance qui rentre dans le cadre théorique de MC : $p(y) = \mathbb{E}_{\vec{Y}_N}(P_N(\vec{Y}_N))$ avec $\vec{Y}_N = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N)$ et $P_N(\vec{Y}_N) = \frac{a_N}{p_N} \prod_{i=1}^N (Y_i - y_{ref}) / \hat{k}$ où

- $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ la suite des coefficients issus du développement en série de p ,
- $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de nombres réels strictement positifs tels que $\sum_{n \in \mathbb{N}} p_n = 1$,
- N une variable aléatoire prenant la valeur $n \in \mathbb{N}$ avec la probabilité p_n ,
- et Y_i des v.a. indépendantes et identiquement distribuées par rapport à Y .

L'algorithme d'échantillonnage de $P_N(\vec{Y}_N)$ consiste à échantillonner un monôme de degré n suivant N , et n réalisations y_i suivant Y de façon indépendantes, la contribution

étant $a_n/p_n \prod_{i=1}^n (y_i - y_{ref})$. Ainsi, à condition que l'échantillonnage polynomial reste traitable, il devient possible de considérer n'importe quel profil de k non-linéaire.

3. **[Identification statistique de la nature de la collision : vraie ou virtuelle]** A ce stade, en admettant que le développement en série entière de p est possible, nous nous retrouvons avec une expression de cette probabilité (qui permet d'identifier la nature de la collision) comme l'espérance d'une variable aléatoire : $p(y) = \mathbb{E}_{\vec{Y}_N}(P_N(\vec{Y}_N))$. En choisissant \hat{k} assez grand, alors chaque réalisation de $P_N(\vec{Y}_N) = \frac{a_N}{p_N} \prod_{i=1}^N (Y_i - y_{ref}) / \hat{k}$ est à valeurs dans $[0, 1]$ ⁴ et peut être interprété comme la probabilité avec laquelle on choisit le type de collision (vraie ou virtuelle). En assemblant ces propositions, y est exprimée comme une espérance dont la forme est très voisine de celle du paragraphe 4.1.1,

$$y = \mathbb{E}_Y(Y) \quad (4.32)$$

avec Y définie telle que,

$$Y(t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \hat{\mathcal{E}}) y_I \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \hat{\mathcal{E}}) \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(P_N(\vec{Y}_N(t - \hat{\mathcal{E}}))) S(t - \hat{\mathcal{E}}) \\ + (1 - \mathcal{B}(P_N(\vec{Y}_N(t - \hat{\mathcal{E}})))) Y(t - \hat{\mathcal{E}}) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (4.33)$$

où $\hat{\mathcal{E}}$ suit une loi exponentielle de paramètre \hat{k} et $\mathcal{B}(P)$ est une variable aléatoire de Bernoulli de paramètre aléatoire P . Toute la différence réside dans le fait que $P_N(\vec{Y}_N(t - \hat{\mathcal{E}}))$ est une variable aléatoire non pas seulement du fait qu'elle est évaluée à l'instant $t - \hat{\mathcal{E}}$ et que le temps de retour $\hat{\mathcal{E}}$ est aléatoire, mais aussi parce que sa définition implique la variable aléatoire Y elle-même. Une réalisation de Y à un temps donné demandera éventuellement plusieurs autres réalisations de Y à un autre temps, etc. Les algorithmes sont branchants.

L'algorithme d'échantillonnage de Y est décrit dans l'Algorithme 16. En résumé, cet algorithme consiste à tirer un temps de retour en exponentielle pour échantillonner le prochain évènement de collision, si cet instant est situé avant la condition initiale alors on retient la valeur initiale de y , sinon on échantillonne un monôme de degré n suivant N , on échantillonne n réalisations indépendantes notées y_1, y_2, \dots, y_n de Y à l'instant correspondant, ces n réalisations étant à l'origine de la génération de n branches au moment de la collision, et on construit la probabilité $\tilde{p} = a_n/p_n \prod_{i=1}^n (y_i - y_{ref})$. Ensuite, avec la probabilité \tilde{p} on retient S à l'instant correspondant comme poids de MC, et avec la probabilité $1 - \tilde{p}$ on retient y à l'instant correspondant. Si y est inconnue, on la remplace par un échantillonnage récursif de Y (indépendant de $P_N(\vec{Y}_n)$) que l'on justifie via le principe de double randomisation.

4. En effet, c'est toujours possible en reportant le signe de la probabilité dans le poids de MC, la conséquence étant que les réalisations ne sont plus à valeurs dans $[y_{min}, y_{max}]$ mais à valeurs dans $[-y_{max}, y_{max}]$ (on considère $y_{min} > 0$). Dans l'ensemble des configurations étudiés, nous verrons que le signe reste positif.

Algorithme 16 : Fonction $F(t)$ d'échantillonnage récursif de Y au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = y_I$ ou $w = S(t')$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F au temps t' .

```

1 Échantillonner  $s$  suivant  $\hat{\mathcal{E}}$ ;
2  $t' = t - s$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = y_I$ ;
5 else
6   | Échantillonner  $n$  suivant  $N$ ;
7   | Échantillonner  $y_i = F(t')$  pour  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$  (génération de  $n$  branches);
8   |  $p = \frac{a_n}{p_n} \prod_{i=1}^n (y_i - y_{ref})$ ;
9   | Échantillonner  $r$  suivant  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
10  | if  $r < p$  then
11  |   |  $w = S(t')$ ;
12  | else
13  |   |  $w = F(t')$ ;

```

Nous expliquons dans les sections suivantes comment nous avons pu employer cette démarche pour élaborer des algorithmes de MC associés aux problèmes de transferts thermiques non-linéaires suivants : un problème de conduction thermique avec une conductivité dépendante de la température $\lambda(T)$, un problème de rayonnement thermique entre surfaces opaques grises en σT^4 , un problème avec une condition à la limite conducto-convective et un coefficient d'échange convectif dépendant de la température $h(T)$, et enfin un problème de conduction thermique avec une capacité calorifique dépendant de la température $C(T)$. Pour chacun de ces transferts non-linéaires, la grandeur y de l'équation (4.30) sera finalement la température T et les poids de MC seront bornés, car retournant une température comprise entre la température maximale et minimale du système, le majorant de $k(T)$ sera facilement déterminé.

L'un des principaux objectifs sera de faire rentrer ces différents transferts thermiques dans le cadre formel de MCNL décrit dans cette synthèse, tout en gardant à l'esprit que l'algorithme 16 n'est exploitable qu'à grand Knudsen, du fait que chaque collision est suivie de la génération d'un certain nombre de branches selon le profil non-linéaire du coefficient d'extinction.

4.2 Tentative pour $\lambda(T)$ en conduction thermique

L'objectif est de construire un algorithme de Monte-Carlo évaluant une estimation de la température T solution de l'équation de la chaleur non-linéaire avec une conductivité dépendante de la température, dont le modèle de transfert de chaleur est donné ci-dessous,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T = -\operatorname{div}(-\lambda(T) \vec{\nabla} T) & , \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^n, t \in [t_I, +\infty[\\ T(\vec{x}, t_I) = T_I & , \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (4.34)$$

où ρ et C représentent respectivement la masse volumique et la capacité calorifique supposées uniformes, λ la conductivité thermique qui dépend de la température T au point \vec{x} au temps t , T_I la condition initiale au temps t_I . Pour simplifier le problème, nous avons choisi de

considérer dans un premier temps un domaine infini en laissant de coté les problèmes liés à la prise en compte des conditions de bord.

Malgré l'existence des trois algorithmes de MCNL présentés précédemment (combinés dans la section 4.1.4), nous n'avons pas réussi à élaborer un algorithme de MC praticable face à ce problème de transfert de chaleur non-linéaire (4.34). L'impasse que nous avons rencontrée est essentiellement due à l'apparition d'un gradient spatial de température dans le coefficient d'extinction hétérogène (dépendance au temps) de notre formulation intégrale (voir Annexe E). De façon analogue au travail réalisé dans la synthèse 4.1.4, nous avons essayé d'employer un ACN pour gérer l'hétérogénéité, la conséquence étant le report de la non-linéarité dans la probabilité p de collision. Malheureusement, cette fois-ci, la probabilité est une fonction du gradient de température qui une fois discrétisé est exprimé comme une différence de températures, les réalisations des v.a. associées à p (que nous avons considérées) n'étant pas à valeurs dans $[0, 1]$, d'où l'impasse⁵.

Pour cette raison, nous avons choisi de remplacer le modèle macroscopique (4.34) par un modèle mésoscopique équivalent, mais dont la solution s'écrit sous une forme intégrale ne faisant plus apparaître que la valeur de la température locale et non son gradient. Le modèle mésoscopique est présenté dans la section suivante.

4.2.1 Similitude entre la température T et une densité de particule η

Nous partons d'une équation de transport de type Boltzmann linéaire, l'Equation de Transfert Radiatif (ETR) sans absorption et sans émission, i.e. une modélisation de type mésoscopique, dont on sait qu'à forte épaisseur optique, elle est une bonne approximation de la diffusion macroscopique [87].

$$\begin{cases} \partial_t f_{\vec{u}} + c\vec{u} \cdot \vec{\nabla} f_{\vec{u}} = -k f_{\vec{u}} c + \int_{4\pi} k c f_{\vec{u}'} p_S(\vec{u}' | \vec{u}) d\vec{u}' \\ f_{\vec{u}}(\vec{x}, t_I) = f_I(\vec{x}) \end{cases} \quad (4.35)$$

où $f_{\vec{u}} \equiv f_{\vec{u}}(\vec{x}, t)$ est la fonction de distribution, avec \vec{x} la position, \vec{u} la direction de propagation et t le temps. La vitesse des particules est notée c , k est le coefficient de diffusion (coefficient d'extinction), p_S la fonction de phase, \vec{u}' une direction, f_I la condition initiale isotrope et t_I le temps initial.

En se plaçant sous les hypothèses d'approximation $P1$ et de diffusion, notées (H) (voir Annexe F), la densité de particule $\eta(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} f_{\vec{u}}(\vec{x}, t) du$ vérifie :

$$\begin{cases} \partial_t \eta = -\text{div} \left(-\frac{c}{nk(1-g)} \nabla \eta \right) \\ \eta(\vec{x}, t_I) = \eta_I(\vec{x}) = 4\pi f_I(\vec{x}) \end{cases} \quad (4.36)$$

où n est la dimension spatiale du problème et g le paramètre d'asymétrie que l'on choisit nul (fonction de phase isotrope). Nous établissons alors une similitude entre la température T et

5. De toute façon, même si nous avons réussi à ramener ces réalisations dans $[0, 1]$, cette différence de valeurs proches pour évaluer un gradient aurait posé des problèmes de variance.

la densité de particules η .

$$\left\{ \begin{array}{l} (4.34) \quad \left\{ \begin{array}{l} \partial_t T + \operatorname{div} \left(-\frac{\lambda(T)}{\rho C} \vec{\nabla} T \right) = 0 \\ T(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \end{array} \right. \\ (4.36) \quad \left\{ \begin{array}{l} \partial_t \eta + \operatorname{div} \left(-\frac{c}{nk} \vec{\nabla} \eta \right) = 0 \\ \eta(\vec{x}, t_I) = \eta_I(\vec{x}) = 4\pi f_I(\vec{x}) \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (4.37)$$

Cette similitude devient totale⁶ en choisissant comme coefficient de diffusion $k(T) = c\rho C/n\lambda(T)$, en supposant que la vitesse des particules c est uniforme et que la condition initiale vérifie $\eta_I = T_I$. Sous ces contraintes, η est égale à T sous l'hypothèse (H) et on note $\eta \stackrel{H}{=} T$. En conclusion, nous choisissons comme modèle à diffusion locale équivalent au modèle (4.34), le modèle suivant,

$$\left\{ \begin{array}{l} T(\vec{x}, t) \stackrel{H}{=} \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du \, 4\pi f_{\vec{u}}(\vec{x}, t) \\ \partial_t f_{\vec{u}} + c\vec{u} \cdot \vec{\nabla} f_{\vec{u}} = -k(T)c f_{\vec{u}} + \int_{4\pi} k(T)c f_{\vec{u}'} p_S(\vec{u}'|\vec{u}) d\vec{u}' \\ f_{\vec{u}}(\vec{x}, t_I) = f_I(\vec{x}) \end{array} \right. \quad (4.38)$$

où $f_I(\vec{x}) = T_I(\vec{x})/4\pi$ et $k(T) = c\rho C/n\lambda(T)$. Dans ce modèle, la vitesse des particules c est fixée de façon implicite de telle sorte que l'hypothèse (H) soit vérifiée.

4.2.2 Modèle approché, formulation intégrale et algorithme de Monte-Carlo

Nous venons de montrer, sous l'hypothèse (H), en choisissant astucieusement le coefficient de diffusion et la condition initiale f_I , que le modèle mésoscopique (4.38) est équivalent au modèle macroscopique (4.34). Cette hypothèse (H) est vérifiée à condition que le coefficient de diffusion k soit infiniment grand pour que l'approximation de diffusion soit valable. Vérifier (H) revient donc à choisir théoriquement, une vitesse des particules infinie ce qui n'est pas acceptable d'un point de vue numérique. Il devient donc nécessaire de dégrader le modèle en un modèle approché où l'on choisit de considérer comme paramètre du modèle le libre parcours moyen majorant $\delta_{me} = \hat{k}^{-1}$ que l'on ajuste en fixant la vitesse des particules c : $\delta_{me} = n\lambda_{min}/c\rho C$ où λ_{min} est un minorant de λ . La consistance nous assure la convergence entre les solutions de ces deux modèles à la limite où le paramètre de discrétisation tend vers zéro. Le modèle approché que nous venons de décrire est donné formellement ci-dessous,

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{T}(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du \, \tilde{f}_{\vec{u}}(\vec{x}, t) \\ \partial_t \tilde{f}_{\vec{u}} + c\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \tilde{f}_{\vec{u}} = -k(\tilde{T})\tilde{f}_{\vec{u}}c + \int_{4\pi} k(\tilde{T})c \tilde{f}_{\vec{u}'} p_S(\vec{u}'|\vec{u}) d\vec{u}' \\ \tilde{f}_{\vec{u}}(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \end{array} \right. \quad (4.39)$$

où $\tilde{f}_{\vec{u}} = 4\pi f_{\vec{u}}$, $k(T) = c\rho C/n\lambda(T)$ et $c = n\lambda_{min}/\delta_{me}\rho C$ avec δ_{me} le paramètre numérique. De façon à concentrer l'étude de la non-linéarité $\lambda(T)$ sur un exemple le plus simple possible, nous choisissons de n'étudier que des matériaux pour lesquels il est possible de linéariser la

6. égalité entre la valeur de la température T et la valeur de la densité de particules η

dépendance à T de $1/\lambda$ soit $1/\lambda_{ref} + \beta(T - T_{ref})$ où λ_{ref} est la conductivité de référence, β un paramètre pilotant l'importance de la non-linéarité et T_{ref} la température de référence.

A ce stade, la température \tilde{T} est exprimée comme la valeur moyenne de $\tilde{f}_{\vec{u}}$ sur toutes les directions \vec{u} de la sphère, et peut donc être formulée comme une espérance,

$$\tilde{T}(\vec{x}, t) = \mathbb{E}_{\vec{U}} \left(\tilde{f}_{\vec{U}}(\vec{x}, t) \right) \quad (4.40)$$

Cependant, la densité $\tilde{f}_{\vec{u}}$ n'est connue que comme la solution de l'équation de transport non-linéaire. On peut alors remarquer que si on enlève la spatialisation, cette équation de transport devient similaire à l'équation (4.30) présentée dans la synthèse 4.1.4. En partant de cette similitude, nous allons donc pouvoir mimer la démarche présentée dans la synthèse en commençant par identifier le lieu de la non-linéarité⁷.

1. **[Coefficient d'extinction k et ACN]** : La grandeur recherchée est $\tilde{T}(\vec{x}, t)$ et elle sera estimée via l'échantillonnage d'une variable aléatoire que nous noterons Θ et qui vérifie $\mathbb{E}_{\Theta}(\Theta(\vec{x}, t)) = \tilde{T}(\vec{x}, t)$. En vue de la définition de cette variable aléatoire, nous avons réussi à reformuler le problème de sorte que la non-linéarité passe par un coefficient d'extinction $k(\tilde{T})$ qui n'est rien d'autre que le coefficient de diffusion de l'équation de transport non-linéaire 4.39. Cela nous permet d'appliquer la méthode des ACN (voir section 4.1.1), qui conduit à la définition de la probabilité $p(\tilde{T}) = k(\tilde{T})/\hat{k}$ qu'une collision trouvée soit une collision réelle (et non pas virtuelle), où \hat{k} est un majorant constant de k . A ce stade, il n'est pas encore possible de choisir \hat{k} . En effet, comme nous l'avons vu dans la section 4.1.4, $p(\tilde{T})$ sera remplacé par une réalisation d'une variable aléatoire et il faudra choisir \hat{k} de telle sorte que toutes ces réalisations soient à valeurs dans $[0, 1]$. Nous ne pourrons donc déterminer la valeur de \hat{k} que seulement après avoir défini la v.a. associée à $p(\tilde{T})$.
2. **[Branchement pour définir la nature de la collision]** : En suivant notre synthèse, la seconde étape serait de développer $p(\tilde{T})$, donc $k(\tilde{T})$, en série entière, puis à chaque collision, à une position \vec{x}' et un temps t' , tirer un ordre n dans le développement et construire des réalisations $\theta_1, \theta_2 \dots \theta_n$ de variables aléatoires i.i.d. $\Theta_1, \Theta_2 \dots \Theta_n$ telles que $\mathbb{E}_{\Theta_i}(\Theta_i(\vec{x}', t')) = \tilde{T}(\vec{x}', t')$. Mais dans le présent exemple ($1/\lambda$ linéarisé autour d'une température de référence) la fonction k est linéaire. Cette étape de développement en série entière n'est donc pas nécessaire et à chaque collision il suffira de faire une seule réalisation θ_1 de Θ_1 pour définir $p(\theta_1) = k(\theta_1)/\hat{k}$ qui sera utilisé pour choisir le type de collision. A chaque collision, l'algorithme ne fera donc naître qu'une seule branche.
3. **[Le choix de \hat{k}]** : Pour que $p(\theta_1)$ soit utilisé comme une probabilité dans un test de Bernoulli il faut s'assurer que ses valeurs sont dans $[0, 1]$ quelque soit la valeur de la réalisation θ_1 de Θ_1 . C'est à ce stade qu'intervient le choix de \hat{k} , à partir de l'expression

7. Cette non-linéarité peut être interprétée physiquement de la façon suivante : si β est positif alors plus la température est élevée et plus la conductivité est faible, ce qui se traduit dans notre modèle mésoscopique par le fait que le coefficient d'extinction et le nombre de collisions sont grands. C'est le contraire pour β négatif.

de $p(\theta_1)$ et de ce que nous savons de l'univers de Θ_1 (les valeurs possibles de θ_1) :

$$\begin{aligned}
p(\theta_1) &= \frac{k(\theta_1)}{\hat{k}} \\
&= \frac{1}{\hat{k}} \left(\frac{c\rho C}{n} \frac{1}{\lambda(\theta_1)} \right) \\
&= \frac{1}{\hat{k}} \left(\frac{c\rho C}{n} \left(\frac{1}{\lambda_{ref}} + \beta(\theta_1 - T_{ref}) \right) \right)
\end{aligned} \tag{4.41}$$

et nous savons que θ_1 résultera d'une marche aléatoire qui ramènera soit une valeur de température à la limite du domaine, soit une valeur de température correspondant à la condition initiale. Ses valeurs appartiennent donc à une plage $[T_{min}, T_{max}]$ connue. En fonction du signe de β la valeur maximum de $k(\theta_1)$ sera soit $k(T_{min})$ soit $k(T_{max})$ et on peut retenir $\hat{k} = \max(k(T_{min}), k(T_{max}))$ qui assurera bien que $p(\theta_1)$ soit toujours dans $[0, 1]$.

L'expression intégrale de la température résultante est la suivante,

$$\tilde{T}(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \underbrace{\int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l) dl \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \frac{l}{c}) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \frac{l}{c}) \left(\begin{array}{c} p(\tilde{T}) \quad \tilde{T} \\ +(1 - p(\tilde{T})) \quad \tilde{f}_{\vec{u}} \end{array} \right)_{|(\vec{x}-l\vec{u}, t-\frac{l}{c})} \end{array} \right)}_{\tilde{f}_{\vec{u}}(\vec{x}, t)} \tag{4.42}$$

soit

$$\begin{cases} \tilde{T} = \mathbb{E}_{\Theta}(\Theta) \\ \tilde{f}_{\vec{u}} = \mathbb{E}_{\mathcal{F}_{\vec{u}}}(\mathcal{F}_{\vec{u}}) \end{cases} \tag{4.43}$$

solution de l'Eq. (4.39) où

$$\begin{cases} \Theta(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \frac{\mathcal{L}}{c}) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{U}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \frac{\mathcal{L}}{c}) \left(\begin{array}{c} \mathcal{B}(p(\Theta_1)) \quad \Theta_2 \\ +(1 - \mathcal{B}(p(\Theta_1))) \quad \mathcal{F}_{\vec{U}} \end{array} \right)_{|(\vec{x}-\mathcal{L}\vec{u}, t-\frac{\mathcal{L}}{c})} \end{array} \right) \\ \mathcal{F}_{\vec{u}} = \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \frac{\mathcal{L}}{c}) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \frac{\mathcal{L}}{c}) \left(\begin{array}{c} \mathcal{B}(p(\Theta_1)) \quad \Theta_2 \\ +(1 - \mathcal{B}(p(\Theta_1))) \quad \mathcal{F}_{\vec{u}} \end{array} \right)_{|(\vec{x}-\mathcal{L}\vec{u}, t-\frac{\mathcal{L}}{c})} \end{array} \right) \end{cases} \tag{4.44}$$

où

- T_I est la condition initiale à l'instant t_I ,
- \vec{U} une loi uniforme sur la sphère,
- \mathcal{L} une loi exponentielle de paramètre $1/\delta_{me}$,
- $c = n\lambda_{min}/\rho C\delta_{me}$,
- Θ_1 et Θ_2 sont deux v.a. indépendantes et identiquement distribuées par rapport à Θ ,
- la fonction $p : T \in [T_{min}, T_{max}] \mapsto k(T)/\hat{k} = \lambda_{min}/\lambda(T)$ prenant donc ses valeurs dans $[0, 1]$ et pouvant être interprétée comme une probabilité,

- $\mathcal{B}(p(\Theta))$ suit une loi de Bernoulli de paramètre aléatoire $p(\Theta)$,

Les algorithmes d'échantillonnage de Θ et $\mathcal{F}_{\vec{u}}$ sont décrits dans les Algorithmes 17 et 18 respectivement.

Algorithme 17 : Fonction $F_{\Theta}(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F_{Θ} ou de $F_{\mathcal{F}_{\vec{u}}}$ à la position \vec{x}' au temps t' .

```

1 Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$ ;
2 Échantillonner  $l$  suivant  $\mathcal{L}$ ;
3  $t' = t - l/c$ ;
4 if  $t_I > t'$  then
5   |  $w = T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u})$ ;
6 else
7   |  $\vec{x}' = \vec{x} - l\vec{u}$ ;
8   |  $\theta_1 = F_{\Theta}(\vec{x}', t')$  (génération d'une branche);
9   |  $p = \lambda_{min} \left( \frac{1}{\lambda_{ref}} + \beta(\theta_1 - T_{ref}) \right)$ ;
10  | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
11  | if  $r < p$  then
12  |   |  $w = F_{\Theta}(\vec{x}', t')$ ;
13  | else
14  |   |  $w = F_{\mathcal{F}_{\vec{u}}}(\vec{x}', t')$ ;

```

Algorithme 18 : Fonction $F_{\mathcal{F}_{\vec{u}}}(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de $F_{\mathcal{F}_{\vec{u}}}$ ou de F_{Θ} à la position \vec{x}' au temps t' . (identique à l'Algorithme 17 sans l'échantillonnage de la direction \vec{u}).

```

1 Échantillonner  $l$  suivant  $\mathcal{L}$ ;
2  $t' = t - l/c$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u})$ ;
5 else
6   |  $\vec{x}' = \vec{x} - l\vec{u}$ ;
7   |  $\theta_1 = F_{\Theta}(\vec{x}', t')$  (génération d'une branche);
8   |  $p = \lambda_{min} \left( \frac{1}{\lambda_{ref}} + \beta(\theta_1 - T_{ref}) \right)$ ;
9   | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
10  | if  $r < p$  then
11  |   |  $w = F_{\Theta}(\vec{x}', t')$ ;
12  | else
13  |   |  $w = F_{\mathcal{F}_{\vec{u}}}(\vec{x}', t')$ ;

```

Ces deux algorithmes sont identiques à un échantillonnage près, un tirage directionnel supplémentaire pour l'Algorithme 17 en début de procédure. A cet échantillonnage près, les deux algorithmes consistent à tirer en exponentielle la longueur jusqu'à la prochaine collision,

si cette collision a lieu avant la condition initiale alors on retient la valeur initiale de T à la position correspondante, sinon on échantillonne une réalisation θ_1 suivant Θ_1 à l'instant et position correspondants via la génération d'une branche, et on construit la probabilité $p(\theta_1)$. Ensuite, avec cette probabilité on retient \tilde{T} à l'instant et position correspondants comme poids de MC, et avec la probabilité complémentaire on retient $\tilde{f}_{\vec{u}}$ à l'instant et position correspondants comme poids de MC. Si \tilde{T} ou $\tilde{f}_{\vec{u}}$ sont inconnues, on les remplace par un échantillonnage récursif de Θ_2 et $\mathcal{F}_{\vec{u}}$ respectivement, via le principe de double randomisation.

$$\tilde{T}(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} p_{\vec{U}}(\vec{u}) d\vec{u} \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l) dl \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \frac{l}{c}) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \frac{l}{c}) \left(\begin{array}{l} p(\tilde{T}) \tilde{T} \\ + (1 - p(\tilde{T})) \tilde{f}_{\vec{u}} \end{array} \right) \end{array} \right)_{|\vec{x} - l\vec{u}, t - \frac{l}{c}}$$

échantillonnage d'une direction échantillonnage d'une longueur test sur la condition initiale atteinte ou non condition initiale à la position correspondante

$\tilde{f}_{\vec{u}}(\vec{x}, t)$ test sur le type de collision: vraie ou virtuelle poids récursif de MC

Il est alors possible de donner une interprétation physique du transfert par conduction non-linéaire telle qu'elle est définie par les Algorithmes 17 et 18 : la température locale est exprimée comme la moyenne des températures au bout d'un grand nombre de chemins. Ces chemins sont échantillonnés suivant le modèle mésoscopique, la non-linéarité étant reportée dans le coefficient d'extinction $k(T)$. L'hétérogénéité de $k(T)$ a pour conséquence une longueur de collision variable : plus k est élevé (plus la conductivité est faible) et plus les longueurs échantillonnées seront courtes. Autrement dit, plus le matériau est isolant et plus les chemins auront tendance à rester confinés à l'intérieur du solide, ce qui se traduira par une augmentation du nombre de collisions.

Pour reproduire l'hétérogénéité de k algorithmiquement, on utilise un ACN qui consiste à générer trop de collisions (suivant \hat{k}), puis rectifie ce surplus de collisions via une probabilité de rejet $p(T) = k(T)/\hat{k}$: plus p est faible (plus la conductivité est élevée) et plus il y a de chances pour que la collision échantillonnée soit rejetée.

Cette probabilité de rejet dépend de la température qui est inconnue. On remplace alors $p(T)$ par une réalisation de $p(\Theta_1)$ qui est à l'origine d'une branche. Ainsi, à chaque collision, qu'elle soit réelle ou non, est générée une branche dont le rôle est de fournir une information aléatoire sur la température locale pour déterminer la nature de la collision vraie ou virtuelle.

Pour minimiser le nombre de collisions et donc de branches, l'idée est de considérer un majorant \hat{k} le plus ajusté possible au profil de $k(T)$ (tout en prenant garde au fait que les réalisations de $p(\Theta)$ doivent être à valeurs dans $[0, 1]$) : plus \hat{k} sera ajusté et plus le nombre de collisions sera faible. Le profil de $k(T)$ n'est pas connu à l'avance, puisqu'il dépend du champ de température. Il est donc difficile d'envisager un majorant \hat{k} bien ajusté.

Dans la suite du manuscrit, nous avons choisi d'utiliser \hat{k} uniforme dans le domaine quitte à réaliser beaucoup trop de collisions, dont la plupart se traduisent finalement par des rejets. Des techniques informatiques de type grille accélératrice pourraient être envisagées à ce stade, mais nous n'avons pas travaillé la question. Une illustration de ces différentes idées est présentée Figure 4.7.

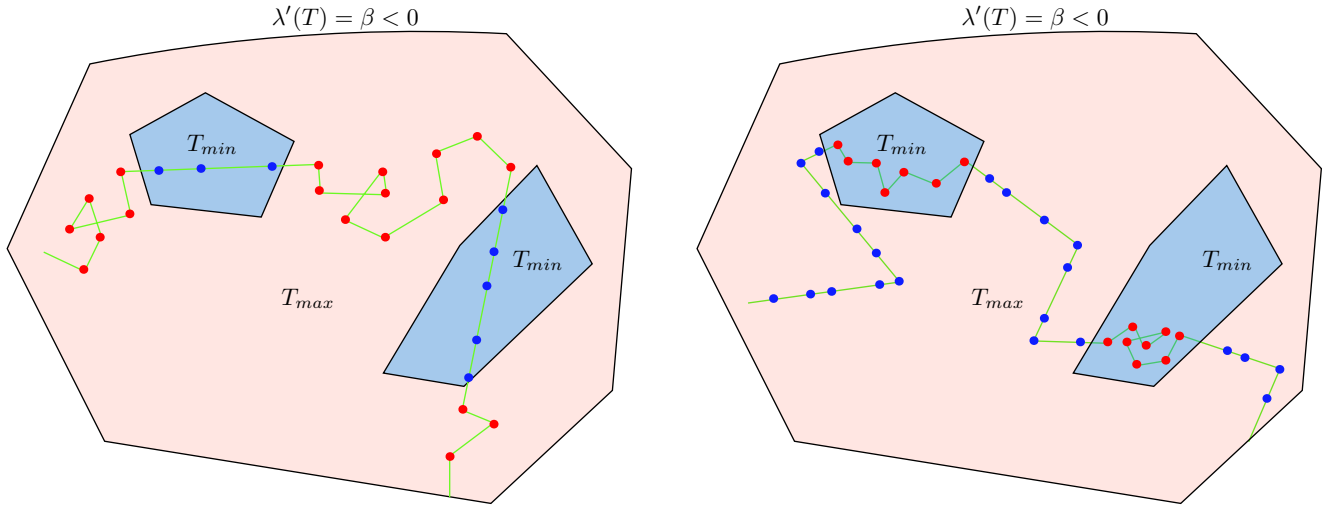


FIGURE 4.7 – Illustration d’un domaine constitué d’une zone chaude en rouge et d’une zone froide en bleu, à des températures T_{max} et T_{min} respectivement, la température étant uniforme dans chaque zone. Dans le cas où la conductivité est une fonction croissante de la température i.e. $\beta < 0$, la trajectoire subit beaucoup de collisions dans les zones chaudes et peu dans les zones froides. Inversement, lorsque la conductivité est une fonction décroissante de la température i.e. $\beta > 0$, la trajectoire subit beaucoup de collisions dans les zones froides et peu dans les zones chaudes. Le nombre de rejets est d’autant plus élevé que la probabilité $p(T) = (1/\lambda_{ref} + \beta(T - T_{ref}))/\hat{k}$ est faible. Les zones chaudes et froides ne sont pas connues à l’avance.

En résumé, cette étude a débuté avec comme principal objectif d’élaborer un algorithme de MCNL directement à partir du modèle macroscopique (4.34), conduisant à une impasse essentiellement due au gradient spatial de la température intervenant dans la formulation intégrale résultante, qui une fois discrétisé est exprimé comme une différence de températures. N’ayant pas trouvé de reformulation intégrale adéquate, nous avons choisi de remplacer l’étude de ce modèle macroscopique par l’étude d’un modèle mésoscopique équivalent, et avons ensuite considéré une version approchée de ce modèle, pour envisager la résolution numérique. Dans ce modèle mésoscopique, la non-linéarité était entièrement pilotée par le coefficient d’extinction k , empêchant l’échantillonnage des collisions. Il a été finalement rendu possible grâce à l’emploi d’un ACN, d’où le report de la non-linéarité dans la probabilité $p(\tilde{T})$ dont le rôle principal est d’identifier si la collision est vraie ou virtuelle. Pour lever cette indétermination, nous avons remplacé la probabilité p par une espérance dont les réalisations de la v.a. associée sont comprises entre 0 et 1, chacune de ces réalisations pouvant être interprétée comme une probabilité. Chaque échantillonnage lié à l’évaluation de p étant à l’origine d’une branche : ici une branche est générée à chaque collision. Finalement, résoudre la formulation intégrale que nous proposons, au sens de MCNL, est possible à condition que le Knudsen ne soit pas trop petit, i.e. que le nombre de collisions moyen le long d’une trajectoire ne soit pas trop grand.

A ce stade, le travail n’est fait qu’à moitié, car contrairement aux différentes études réalisés par G. Terrée, l’estimation obtenue à partir des Algorithmes 17 et 18 n’a aucun sens si le nombre moyen de collisions le long d’une trajectoire est faible, i.e. à Knudsen grand. Une petite valeur de Knudsen est une condition nécessaire pour que notre modèle approché

soit une approximation acceptable du modèle d'origine (Knudsen petit étant équivalent à δ_{me} petit), et donc que l'estimation de \tilde{T} soit une bonne approximation de la température T . Cette condition implique une augmentation du nombre de collisions et donc du nombre de branches générées, entraînant une impraticabilité de l'algorithme.

Nous verrons dans le prochain chapitre qu'il est possible de contourner cette difficulté en employant une méthode itérative, quitte à perdre l'exactitude.

4.3 Tentative pour σT^4 en rayonnement thermique

Nous nous intéressons à présent à la résolution par Monte-Carlo de l'équation conducto-convecto-radiative non-linéaire,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T = -\operatorname{div}(-\lambda \vec{\nabla} T) \quad , & \vec{x} \in \Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \partial_{\vec{n}} T_b = -\sigma \left(T_b^4 - \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma T_\gamma^4 \right) + h_F(T_F - T_b) \quad , & \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ T(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \quad , & \vec{x} \in \Omega \end{cases} \quad (4.45)$$

où la masse volumique ρ , la capacité calorifique C , la conductivité λ et le coefficient de convection h_F peuvent être hétérogènes, mais indépendants de la température.

On note T_b la température de bord, T_I la condition initiale au temps t_I , T_F la température du fluide, Ω le domaine solide, \vec{n} la normale entrante au point $\vec{y} \in \partial\Omega$. Dans cette configuration, les transferts de chaleur sont la conduction à l'intérieur du solide Ω supposé opaque, la convection à l'interface entre le solide et le fluide à travers la couche limite et le rayonnement entre les différentes parois considérées noires, σ étant la constante de Boltzmann.

La variable aléatoire $\Gamma \equiv \Gamma(\vec{y})$ de densité de probabilité p_Γ est définie sur l'espace $\mathcal{D}\Gamma$ de tous les chemins radiatifs, γ correspondant à un photon émis au point \vec{y} et absorbé au point $\vec{y}_\gamma \in \partial\Omega$, T_γ représentant la température de bord au point \vec{y}_γ . Ce modèle met en jeu trois modes de transfert de chaleur : la conduction à l'intérieur du domaine solide, la convection à l'interface entre le solide et le fluide et le rayonnement entre les différentes surfaces constituant le solide toutes assimilées à des corps noirs.

Dans le but d'attaquer la résolution numérique de l'équation (4.45), nous considérons le modèle approché (4.46) où seul le transfert par conduction est dégradé (le transfert par conduction en géométrie confinée ne pouvant être résolu qu'avec approximation, voir section 5.17).

$$\begin{cases} \rho C \partial_t \tilde{T} = \lambda \left(\frac{\mathbb{E}_{\vec{U}}(\tilde{T}_{\vec{U}}) - 2n\tilde{T}}{\delta^2} \right) \quad , & \vec{x} \in \Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\tilde{T}_\delta - \tilde{T}_b}{\delta} = -\sigma \left(\tilde{T}_b^4 - \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \tilde{T}_\gamma^4 \right) + h_F(T_F - \tilde{T}_b) \quad , & \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ \tilde{T}(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \quad , & \vec{x} \in \Omega \end{cases} \quad (4.46)$$

où le pas de discrétisation $\delta \equiv \delta(\vec{x}, \vec{u})$ est défini dans la section 3.4.3.1, $\tilde{T}_\delta(\vec{y}, t) = \tilde{T}(\vec{y} + \delta\vec{n}, t)$ avec \vec{n} la normale sortante de Ω , $\tilde{T}_{\vec{u}} \equiv \tilde{T}_{\vec{u}}(\vec{x}, t) = \tilde{T}(\vec{x} + \delta\vec{u}, t)$, S^{n-1} est la sphère en dimension n et $\vec{U} \sim \mathcal{U}(S^{n-1})$ est une variable aléatoire de loi uniforme sur S^{n-1} .

Dans cette configuration, la non-linéarité n'intervient qu'à la frontière du domaine : dans le solide le transfert par conduction est linéaire, à la frontière le transfert par convection est

linéaire également, mais en revanche le transfert radiatif ne l'est pas, les échanges de chaleur se faisant à la puissance quatre de la température entre les différentes surfaces constituant le solide, toutes assimilées à des corps noirs.

Grâce à ce découpage, d'un coté la conduction et de l'autre la convection et le rayonnement, il devient possible de réemployer le travail qui a déjà été réalisé dans la section 3.4.2, où nous nous étions concentrés sur l'étude du transfert par conduction linéaire et avons proposé une formulation en espérance de la température à l'intérieur du domaine solide, $\tilde{T} = \mathbb{E}_\Theta(\Theta)$. Le travail restant consiste alors à réaliser le couplage (vu ici comme un raccordement) entre la température à l'intérieur du solide \tilde{T} et la température de bords \tilde{T}_b , ce couplage étant entièrement défini par l'égalité du flux de part et d'autre de la frontière entre les deux corps :

$$-\lambda \frac{\tilde{T}_\delta - \tilde{T}_b}{\delta} = -\sigma \left(\tilde{T}_b^4 - \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \tilde{T}_\gamma^4 \right) + h_F(T_F - \tilde{T}_b) \quad (4.47)$$

Comme pour la conductivité non-linéaire, nous commençons par remarquer que cette équation (notamment la reformulation suivante Eq. (4.48)) est similaire à la version (stationnaire) de l'équation (4.30) de la synthèse 4.1.4. Nous pouvons alors à nouveau mimer la démarche présentée dans la synthèse,

1. [**Coefficient d'extinction k et ACN**] : La grandeur recherchée est $\tilde{T}_b(\vec{y}, t)$ et elle sera estimée via l'échantillonnage d'une variable aléatoire que nous noterons Θ_b qui vérifie $\mathbb{E}_{\Theta_b}(\Theta_b(\vec{y}, t)) = \tilde{T}_b(\vec{y}, t)$, la température \tilde{T}_b étant solution de l'égalité du flux que l'on reformule de la façon suivante,

$$\begin{cases} 0 = - \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma) (\tilde{T}_b - S) \\ S = \left(\frac{\lambda/\delta}{k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)} \tilde{T}_\delta + \frac{h_F}{k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)} T_F + \frac{h_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)}{k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)} \tilde{T}_\gamma \right) \end{cases} \quad (4.48)$$

où l'on note $k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma) = \lambda/\delta + h_F + h_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$ et $h_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma) = \sigma (\tilde{T}_b^3 + \tilde{T}_b^2 \tilde{T}_\gamma + \tilde{T}_b \tilde{T}_\gamma^2 + \tilde{T}_\gamma^3)$. Via cette reformulation, qui est strictement équivalente à l'Eq. 4.47, nous faisons en sorte que la non-linéarité passe par le coefficient d'extinction⁸ $k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$. Cela nous permet d'appliquer la méthode des ACN (voir section 4.1.1), qui conduit à la définition de la probabilité $p(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma) = k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)/\hat{k}$ qu'une collision trouvée soit une collision réelle (et non pas virtuelle), où \hat{k} est un majorant constant de k . A ce stade, il n'est pas encore possible de choisir \hat{k} . En effet, comme nous l'avons vu dans la section 4.1.4, $p(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$ sera remplacé par une réalisation d'une variable aléatoire et il faudra choisir \hat{k} de telle sorte que toutes ces réalisations soient à valeurs dans $[0, 1]$. Nous ne pourrons donc déterminer la valeur de \hat{k} que seulement après avoir défini la v.a. associée à $p(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$. Nous rappelons les différentes étapes de la méthode des ACN, dont la mise en œuvre

8. Les "collisions" échantillonnées suivant ce coefficient d'extinction ne sont ni spatiales, ni temporelles !

est un peu particulière dans cette configuration, car le problème est stationnaire :

$$\begin{aligned}
0 &= - \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) (\tilde{T}_b - S) \\
\int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) \tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) S \\
\int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) \tilde{T}_b + k_n \tilde{T}_b &\stackrel{ACN}{=} \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) S + k_n \tilde{T}_b \\
\hat{k} \tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma (k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) S + k_n \tilde{T}_b) \\
\tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma \left(\frac{k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma})}{\hat{k}} S + \frac{k_n}{\hat{k}} \tilde{T}_b \right) \\
\tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma (p(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) S + (1 - p(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma})) \tilde{T}_b)
\end{aligned} \tag{4.49}$$

puis en substituant S par son expression,

$$\begin{aligned}
\tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma \left(\frac{\lambda/\delta}{\hat{k}} \tilde{T}_{\delta} + \frac{h_F}{\hat{k}} T_F + \frac{h_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma})}{\hat{k}} \tilde{T}_{\gamma} + \frac{k_n}{\hat{k}} \tilde{T}_b \right) \\
\tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma (p_{\delta} \tilde{T}_{\delta} + p_F T_F + p_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) \tilde{T}_{\gamma} + p_b(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) \tilde{T}_b)
\end{aligned} \tag{4.50}$$

où $k_n \equiv k_n(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma})$ est choisi tel que $\hat{k} = k + k_n$ est un majorant constant de k , $p_{\delta} = \lambda/\delta\hat{k}$, $p_R = h_R/\hat{k}$, $p_F = h_F/\hat{k}$ et $p_b = k_n/\hat{k} = 1 - p_R - p_{\delta} - p_F$.

2. **[Branchement pour définir la nature de la collision]** : En suivant la procédure exposée dans notre synthèse, la seconde étape serait de développer $p(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma})$, donc $k(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma})$, en série entière, puis à chaque collision, tirer un couple (n, m) dans le développement et construire des réalisations $\theta_{b1}, \theta_{b2} \dots \theta_{bn}, \theta_{\gamma1}, \theta_{\gamma2} \dots \theta_{\gamma m}$ de variables aléatoires i.i.d. $\Theta_{b1}, \Theta_{b2} \dots \Theta_{bn}, \Theta_{\gamma1}, \Theta_{\gamma2} \dots \Theta_{\gamma m}$ telles que $\mathbb{E}_{\Theta_{bi}}(\Theta_{bi}) = \tilde{T}_b$ et $\mathbb{E}_{\Theta_{\gamma i}}(\Theta_{\gamma i}) = \tilde{T}_{\gamma}$. Mais dans le présent exemple la fonction k est polynomiale d'ordre trois en \tilde{T}_b et en \tilde{T}_{γ} . Cette étape de développement en série entière n'est donc pas nécessaire ici et à chaque collision, il suffira d'échantillonner $\vec{\theta}_{b3} = (\theta_{b1}, \theta_{b2}, \theta_{b3})$ suivant $\vec{\Theta}_{b3} = (\Theta_{b1}, \Theta_{b2}, \Theta_{b3})$, puis si la température \tilde{T}_{γ} est inconnue échantillonner $\vec{\theta}_{\gamma3} = (\theta_{\gamma1}, \theta_{\gamma2}, \theta_{\gamma3})$ suivant $\vec{\Theta}_{\gamma3} = (\Theta_{\gamma1}, \Theta_{\gamma2}, \Theta_{\gamma3})$ pour définir

$$\begin{cases} P_R(\vec{\theta}_{b3}, \vec{\theta}_{\gamma3}) = \sigma(\theta_{b1}\theta_{b2}\theta_{b3} + \theta_{b1}\theta_{b2}\theta_{\gamma1} + \theta_{b1}\theta_{\gamma1}\theta_{\gamma2} + \theta_{\gamma1}\theta_{\gamma2}\theta_{\gamma3}) / \hat{k}, & \text{si } \tilde{T}_{\gamma} \text{ est inconnue} \\ P_R(\vec{\theta}_{b3}, (\tilde{T}_{\gamma}, \tilde{T}_{\gamma}, \tilde{T}_{\gamma})) = \sigma(\theta_{b1}\theta_{b2}\theta_{b3} + \theta_{b1}\theta_{b2}\tilde{T}_{\gamma} + \theta_{b1}\tilde{T}_{\gamma}^2 + \tilde{T}_{\gamma}^3) / \hat{k}, & \text{si } \tilde{T}_{\gamma} \text{ est connue} \end{cases} \tag{4.51}$$

qui sera utilisé pour choisir le type de collision.

Que \tilde{T}_{γ} soit inconnue ou connue, on notera indifféremment $P_R(\vec{\theta}_{b3}, \vec{\theta}_{\gamma3})$ avec $\vec{\theta}_{\gamma3} = (\theta_{\gamma1}, \theta_{\gamma2}, \theta_{\gamma3})$ dans le premier cas et $\vec{\theta}_{\gamma3} = (\tilde{T}_{\gamma}, \tilde{T}_{\gamma}, \tilde{T}_{\gamma})$ dans le second. Pour précision, les réalisations $\theta_{\gamma1}, \theta_{\gamma2}$ et $\theta_{\gamma3}$ sont trois réalisations indépendantes de Θ_{γ} ($\gamma1, \gamma2$ et $\gamma3$ n'étant pas trois chemins optiques !). A chaque collision, l'algorithme fera donc naître six ou trois branches selon la nature de \tilde{T}_{γ} .

3. **[Le choix de \hat{k}]** : Pour que $P_R(\vec{\theta}_{b3}, \vec{\theta}_{\gamma3})$ soit utilisé comme une probabilité dans un test de Bernoulli il faut s'assurer que ses valeurs sont dans $[0, 1]$ quelque soit les valeurs des réalisations $\vec{\theta}_{b3}$ de $\vec{\Theta}_{b3}$ et $\vec{\theta}_{\gamma3}$ de $\vec{\Theta}_{\gamma3}$. C'est à ce stade qu'intervient le choix de

\hat{k} , à partir de l'expression de $P_R(\vec{\Theta}_{b3}, \vec{\Theta}_{\gamma3})$ et de ce que nous savons des univers de $\vec{\Theta}_{b3}$ et $\vec{\Theta}_{\gamma3}$: $\vec{\Theta}_{b_i}$ et $\vec{\Theta}_{\gamma_i}$ résulteront d'une marche aléatoire qui ramènera soit une valeur de température à la limite du domaine, soit une valeur de température correspondant à la condition initiale. Ses valeurs appartiennent donc à une plage $[T_{min}, T_{max}]$ connue. On peut donc retenir $\hat{k} = \lambda/\delta + h + \sigma 4T_{max}^3$ qui assurera bien que $P_R(\vec{\Theta}_{b3}, \vec{\Theta}_{\gamma3})$ soit toujours dans $[0, 1]$.

L'expression intégrale de la température résultante est la suivante,

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{T}(\vec{x}, t) = \int_{S^{n-1}} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\vec{x}' \in \mathring{\Omega}) \tilde{T} \\ + \mathcal{H}(\vec{x}' \in \partial\Omega) \tilde{T}_b \end{array} \right)_{|(\vec{x}', t-\tau)} \end{array} \right), \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{x} \in \mathring{\Omega} \\ t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \\ \tilde{T}_b = \int_{\mathcal{D}_{\Gamma}} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma \left(p_{\delta} \tilde{T}_{\delta} + p_F T_F + p_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) \tilde{T}_{\gamma} + p_b(\tilde{T}_b, \tilde{T}_{\gamma}) \tilde{T}_b \right), \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{y} \in \partial\Omega \\ t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \end{array} \right. \quad (4.52)$$

soit

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{T} = \mathbb{E}_{\Theta}(\Theta), \quad \vec{x} \in \mathring{\Omega}, t \in [t_I, +\infty[\\ \tilde{T}_b = \mathbb{E}_{\Theta_b}(\Theta_b), \quad \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (4.53)$$

solution de l'équation (4.46) où

$$\left\{ \begin{array}{l} \Theta(\vec{x}, t) = \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{T}) T_I(\vec{x}) + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{T}) \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\vec{X}' \in \mathring{\Omega}) \Theta \\ + \mathcal{H}(\vec{X}' \in \partial\Omega) \Theta_b \end{array} \right)_{|(\vec{X}', t-\mathcal{T})}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{x} \in \mathring{\Omega} \\ t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \\ \Theta_b = \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p_{\delta}) \Theta_{\delta} \\ + (1 - \mathcal{B}(p_{\delta})) \mathcal{B}(p_F) T_F \\ + (1 - \mathcal{B}(p_{\delta})) (1 - \mathcal{B}(p_F)) \mathcal{B}(P_R(\vec{\Theta}_{b3}, \vec{\Theta}_{\Gamma3})) \Theta_{\Gamma} \\ + (1 - \mathcal{B}(p_{\delta})) (1 - \mathcal{B}(p_F)) (1 - \mathcal{B}(P_R(\vec{\Theta}_{b3}, \vec{\Theta}_{\Gamma3}))) \Theta_b \end{array} \right), \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{y} \in \partial\Omega \\ t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \end{array} \right. \quad (4.54)$$

où

- T_I est la condition initiale à l'instant t_I ,
- \vec{U} une loi uniforme sur la sphère S^{n-1} ,
- \mathcal{T} suit une loi exponentielle de paramètre \hat{k} ,
- $\vec{x}' = \vec{x} + \delta \vec{u}$,
- $\vec{X}' = \vec{x} + \delta \vec{U}$,
- $\tilde{T}_{\delta}(\vec{y}, t) = \tilde{T}(\vec{y} - \delta \vec{u}, t)$,
- $\tilde{T}_{\gamma}(\vec{y}, t) = \tilde{T}(\vec{y}_{\gamma}, t)$,
- $\Theta_{\delta}(\vec{y}, t) = \Theta(\vec{y} - \delta \vec{n}, t)$,
- $\Theta_{\Gamma}(\vec{y}, t) = \Theta_b(\vec{y}_{\Gamma}, t)$,

- $\Theta_\gamma(\vec{y}, t) = \Theta_b(\vec{y}_\gamma, t)$,
- $\vec{\Theta}_{b3} = (\Theta_{b1}, \Theta_{b2}, \Theta_{b3})$ un vecteur aléatoire constitué de trois v.a.i.i.d. suivant Θ_b ,
- $\vec{\Theta}_{\Gamma3} = (\Theta_{\Gamma1}, \Theta_{\Gamma2}, \Theta_{\Gamma3})$ un vecteur aléatoire constitué de trois v.a.i.i.d. suivant Θ_Γ ,
- $\vec{\Theta}_{\gamma3} = (\Theta_{\gamma1}, \Theta_{\gamma2}, \Theta_{\gamma3})$ un vecteur aléatoire constitué de trois v.a.i.i.d. suivant Θ_γ ,
- $P_R(\vec{\Theta}_{b3}, \vec{\Theta}_{\gamma3}) = \sigma(\Theta_{b1}\Theta_{b2}\Theta_{b3} + \Theta_{b1}\Theta_{b2}\Theta_{\gamma1} + \Theta_{b1}\Theta_{\gamma1}\Theta_{\gamma2} + \Theta_{\gamma1}\Theta_{\gamma2}\Theta_{\gamma3})/\hat{k}$,
- \mathcal{B} suit une loi de Bernoulli de paramètre constant ou aléatoire,
- $P_R : (\vec{X}, \vec{Y}) \in [T_{min}, T_{max}]^3 \times [T_{min}, T_{max}]^3 \mapsto P_R(\vec{X}, \vec{Y})$ est à valeurs dans $[0, 1]$.

Les algorithmes d'échantillonnage de Θ et Θ_b sont décrits dans les Algorithmes 24 et 25 respectivement.

Algorithme 19 : Fonction $F_\Theta(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F_Θ ou de F_{Θ_b} à la position \vec{x}' au temps t' .

```

1 Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$ ;
2 Mettre à jour le pas de discrétisation  $\delta \equiv \delta(\vec{x}, \vec{u})$ ;
3 Échantillonner  $\tau$  suivant  $\mathcal{T}(\vec{x}, \vec{u})$ ;
4  $t' = t - \tau$ ;
5 if  $t_I > t'$  then
6   |  $w = T_I(\vec{x})$ ;
7 else
8   |  $\vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{u}$ ;
9   | if  $\vec{x}' \in \overset{\circ}{\Omega}$  then
10  | |  $w = F_\Theta(\vec{x}', t')$ ;
11  | else
12  | |  $w = F_{\Theta_b}(\vec{x}', t')$ ;

```

Algorithme 20 : Fonction $F_{\Theta_b}(\vec{\mathbf{y}}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ_b à la position $\vec{\mathbf{y}}$ au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est systématiquement reporté dans un appel récursif de F_{Θ_b} ou de F_{Θ} à la position $\vec{\mathbf{y}}$ au temps t . (Un algorithme optimisé est proposé dans l'Annexe K)

```

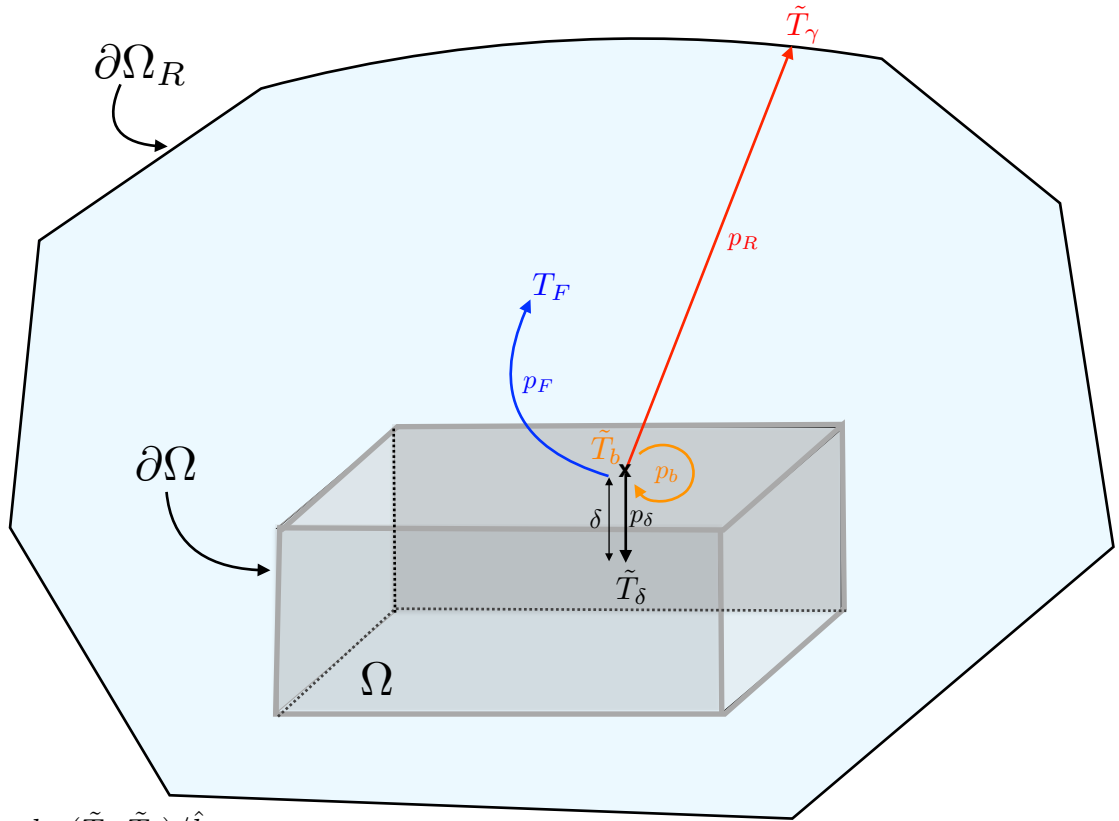
1  $p_\delta = \lambda/\delta\hat{k}$ ;
2  $p_F = h_F/\hat{k}$ ;
3 Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
4 if  $r < p_\delta$  then
5   |  $w = F_{\Theta}(\vec{\mathbf{y}} + \delta\vec{\mathbf{n}}, t)$ ;
6 else if  $p_\delta < r < p_\delta + p_F$  then
7   |  $w = T_F$ ;
8 else
9   |  $\theta_i = F_{\Theta_b}(\vec{\mathbf{y}}, t)$ , pour  $i \in \{1, 2, 3\}$  (génération de 3 branches);
10  | Échantillonner  $\gamma$  suivant  $\Gamma$  au point  $(\vec{\mathbf{y}}, t)$ ;
11  | if  $\tilde{T}_\gamma$  est connue then
12  |   |  $\theta_{\gamma_i} = \tilde{T}_\gamma$ , pour  $i \in \{1, 2, 3\}$  (0 branches générées);
13  | else
14  |   |  $\theta_{\gamma_i} = F_{\Theta_b}(\vec{\mathbf{y}}_\gamma, t)$ , pour  $i \in \{1, 2, 3\}$  (génération de 3 branches);
15  |    $p_R = P_R((\theta_1, \theta_2, \theta_3), (\theta_{\gamma_1}, \theta_{\gamma_2}, \theta_{\gamma_3})) = \sigma(\theta_1\theta_2\theta_3 + \theta_1\theta_2\theta_{\gamma_1} + \theta_1\theta_{\gamma_1}\theta_{\gamma_2} + \theta_{\gamma_1}\theta_{\gamma_2}\theta_{\gamma_3})/\hat{k}$ ;
16  |   if  $p_\delta + p_F < r < p_\delta + p_F + p_R$  then
17  |     |  $w = F_{\Theta_b}(\vec{\mathbf{y}}_\gamma, t)$ ;
18  |   else
19  |     |  $w = F_{\Theta_b}(\vec{\mathbf{y}}, t)$ ;

```

L'Algorithme 24 a déjà été étudié dans la section 3.4.2, il décrit simplement la marche conductive dans le domaine solide, terminant sa trajectoire soit à la condition initiale T_I en un point à l'intérieur du domaine solide $\Omega \setminus \partial\Omega$, soit à la frontière où la température de bord est remplacée par un échantillonnage de Θ_b décrit dans l'Algorithme 25.

Cet algorithme consiste à retenir la température \tilde{T}_δ avec la probabilité p_δ , la température du fluide T_F avec la probabilité p_F . Si aucune de ces deux températures n'est retenue (avec la probabilité $1 - (p_\delta + p_F)$), alors il devient nécessaire d'échantillonner indépendamment trois réalisations de Θ_b (de façon récursive), échantillonner **un seul chemin optique** γ , échantillonner indépendamment trois réalisations de Θ_γ (ces trois échantillonnages étant triviaux si \tilde{T}_γ est connue) pour construire la probabilité p_R .

Ensuite, est retenue la température \tilde{T}_γ avec la probabilité p_R et la température de bord \tilde{T}_b avec la probabilité p_b . Lorsque l'une des ces quatre températures est inconnue, elle est remplacée par une réalisation de sa variable aléatoire associée via le principe de double randomisation. Pour rappel, la somme $p_\delta + p_F + p_R + p_b = 1$.



$$\begin{cases} p_R = h_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma) / \hat{k} \\ p_\delta = \lambda / \delta \hat{k} \\ p_F = h_F / \hat{k} \\ p_b = 1 - p_R - p_\delta - p_F \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} h_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma) = \sigma (\tilde{T}_b^3 + \tilde{T}_b^2 \tilde{T}_\gamma + \tilde{T}_b \tilde{T}_\gamma^2 + \tilde{T}_\gamma^3) \\ \hat{k} = \lambda / \delta + h + \sigma 4T_{max}^3 \end{cases}$$

FIGURE 4.8 – Illustration associée à l’algorithme 25. La température de bord \tilde{T}_b est exprimée comme une pondération des températures $(\tilde{T}_\delta, p_\delta)$, (T_F, p_F) , (\tilde{T}_γ, p_R) et (\tilde{T}_b, p_b) .

Il est alors possible de donner une interprétation physique du transfert radiatif non-linéaire tel qu’il est décrit dans l’Algorithme 25 :

- Premièrement, on constate que les probabilités p_δ et p_F sont constantes (indépendantes de la température). Cette propriété n’est pas surprenante car les transferts de chaleur associés aux transferts par conduction et convection sont linéaires et il n’y a aucune raison que le comportement algorithmique associé à ces deux transferts, en termes de définition et d’échantillonnage d’un espace de chemins, soit influencé par un troisième transfert non-linéaire (voir l’algorithme optimisé dans l’Annexe 5.17).
- Deuxièmement, il apparaît que la non-linéarité est entièrement portée par le couple (p_R, p_b) , qui pilote la probabilité de retenir la température radiative et de retenir la température de bord respectivement, ces deux probabilités étant fonction de la température. Il est alors intéressant de s’attarder un moment sur leurs dépendances à T . Pour cela et dans le but de se concentrer sur la non-linéarité, nous considérons un matériau parfaitement isolant sans fluide i.e. un matériau où les transferts par conduction et convection peuvent être négligés ($p_\delta = p_F = 0$). La température de bord

\tilde{T}_b n'est alors rien d'autre que la racine quatrième de la moyenne des températures radiatives à la puissance quatre :

$$\tilde{T}_b = \left(\int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma T_\gamma^4 \right)^{\frac{1}{4}} \quad (4.55)$$

Dans cette configuration ($p_\delta = p_F = 0$), nous constatons que si les échanges radiatifs ont lieu entre deux zones de températures maximales, telles que les réalisations de Θ_b et Θ_γ ne peuvent être rien d'autre que T_{max} , alors la probabilité $p_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$ est remplacée par $P_R(\vec{\theta}_{b3}, \vec{\theta}_{\gamma3}) = \sigma(T_{max}^3 + T_{max}^3 + T_{max}^3 + T_{max}^3)/\hat{k} = 1$. Dans ce cas, l'algorithme retiendra systématiquement une vraie collision, la température radiative est soit connue et l'algorithme s'arrête, soit inconnue et l'algorithme continue via l'échantillonnage d'une réalisation de θ_γ suivant Θ_γ .

Au contraire, si les échanges radiatifs ont lieu entre deux zones de températures minimales, telles que les contributions de Θ_b et Θ_γ ne peuvent être rien d'autre que la température minimale T_{min} , alors la probabilité $p_R(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$ est remplacée par la réalisation $P_R(\vec{\theta}_{b3}, \vec{\theta}_{\gamma3}) = \sigma(T_{min}^3 + T_{min}^3 + T_{min}^3 + T_{min}^3)/\hat{k} = \left(\frac{T_{min}}{T_{max}}\right)^3$. Dans ce cas, l'algorithme retiendra une collision virtuelle avec la probabilité $1 - \left(\frac{T_{min}}{T_{max}}\right)^3$. Autrement-dit l'algorithme (évaluant \tilde{T}_b) rejette très souvent les collisions si $T_{min} \ll T_{max}$, chaque rejet nécessitant une nouvelle évaluation de la température de bord \tilde{T}_b .

Ainsi, à cette limite, l'algorithme devient rapidement inexploitable du fait que chaque branche génère plus d'une branche et que rien ne vient stopper cette génération. Les transferts par conduction et convection pourront stopper cette génération s'ils ne sont plus négligeables, mais on peut tout de même retenir que si le rayonnement est dominant et si la plage de température échantillonnée est étendue, alors les zones froides voyant des zones froides seront problématiques en termes de multiplication des branches.

En résumé, à la frontière, une fois le chemin optique échantillonné γ , le mode de transfert de chaleur futur (conduction, convection ou rayonnement) de notre chemin est piloté par la température de bord locale \tilde{T}_b et la température radiative \tilde{T}_γ . Comme on l'attend, plus ces températures sont élevées et plus le rayonnement l'emporte sur la conduction et la convection. Mais du fait de la non-linéarité, on doit aussi penser les rejets, et ces rejets sont pilotés par la valeur de ces températures au sein de l'intervalle $[T_{min}, T_{max}]$. Notre façon de gérer la non-linéarité a comme conséquence que les zones proches de la température T_{min} vont se traduire par moins de chance de partir en rayonnement mais généreront beaucoup de branches.

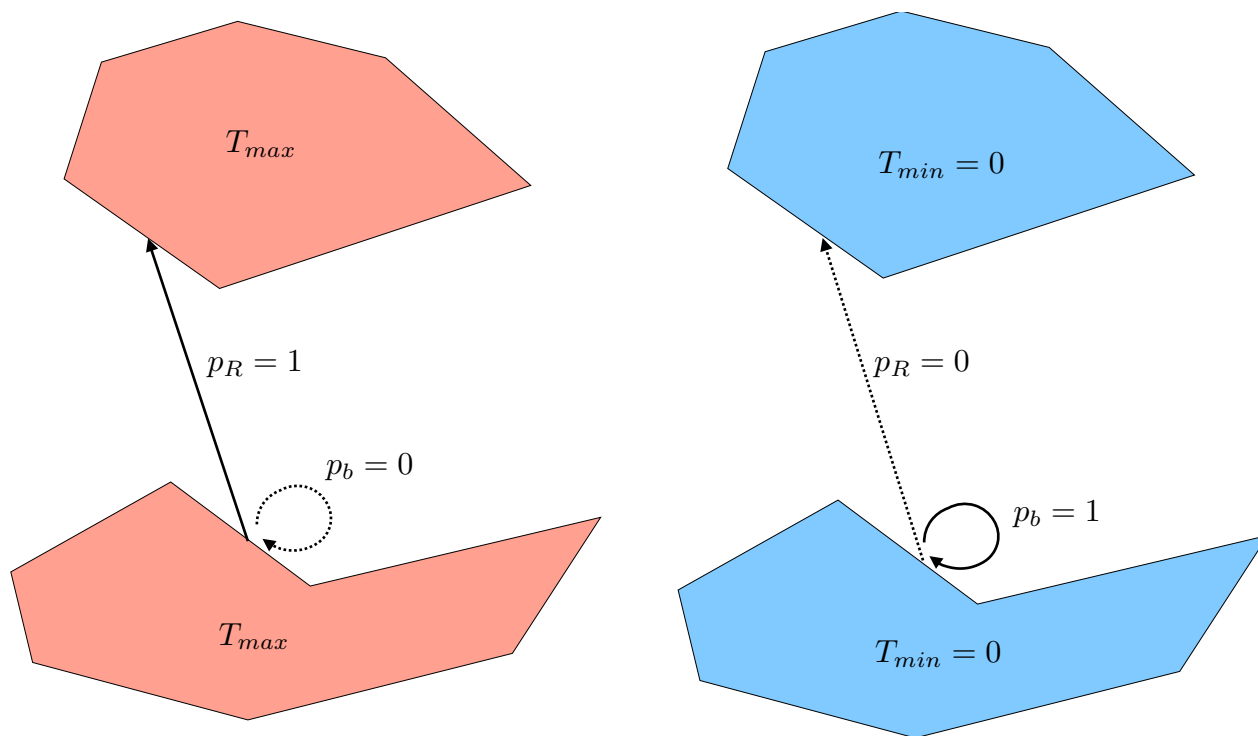


FIGURE 4.9 – Illustration des deux situations décrites précédemment : une situation où les deux surfaces sont chaudes et le transfert radiatif est privilégié, et une autre situation où les deux surfaces sont froides et le côté récursif est privilégié.

Dans l'exemple conductif précédent, nous aboutissions à une impasse de façon systématique car l'utilisation du modèle mésoscopique imposait un grand nombre de collisions et que chaque collision faisait naître une branche. Le trop grand nombre de branches rendait donc l'algorithme impraticable.

Ici, la situation est plus difficile à caractériser. On peut concevoir des configurations pour lesquelles l'algorithme serait praticable. Pour cela, il faut que chaque branche générée ne génère pas à son tour plus d'une branche en moyenne. Cette condition sera d'autant plus atteinte que

- la température \tilde{T}_γ est connue,
- que l'écart de température $T_{max} - T_{min}$ est "petit",
- et que la probabilité $p_\delta + p_F$ est grande⁹.

Dans la pratique, dans des géométries d'applications industrielles, ces critères peuvent-être respectés dans quelques zones, sur quelques surfaces, mais généralement pas en tout point du bord ! Les zones ne respectant pas cette condition (moins d'une branche générée par branche) étant à l'origine de l'impraticabilité de l'algorithme. Ainsi, comme en conduction, il devient nécessaire de chercher une solution approchée.

Nous verrons au chapitre 6, section 7.2, une reformulation intégrale de l'équation (4.50) permettant d'élaborer un algorithme exact, qui sous certaines contraintes exposées le moment venu, sera exploitable.

9. l'Algorithme 25 est exploitable sous la condition $p_\delta + p_F > 3/4$ si \tilde{T}_γ est connue et $p_\delta + p_F > 6/7$ sinon, de telle sorte que chaque branche (générée à la frontière) génère en moyenne moins d'une branche.

4.4 Tentative pour $h_F(T)$ et $C(T)$ en convection et conduction thermique

Dans cette section, nous présentons l'étude de deux types de transferts de chaleur non-linéaires, l'un avec une condition à la limite conducto-convective avec un coefficient d'échange convectif dépendant de la température $h_F(T)$ et l'autre présentant un transfert par conduction avec une capacité calorifique dépendante de la température $C(T)$.

De façon à concentrer l'étude des non-linéarités $h_F(T)$ et $C(T)$ sur des exemples les plus simples possibles, nous choisissons de n'étudier que des matériaux pour lesquels il est possible de linéariser la dépendance à T de h_F soit $h_{ref} + \beta(T - T_{ref})$ et $1/C(T)$ soit $1/C_{ref} + \beta(T - T_{ref})$ où h_{ref} est le coefficient d'échange convectif de référence, C_{ref} la capacité calorifique de référence, β un paramètre pilotant l'importance de la non-linéarité et T_{ref} la température de référence.

Nous avons montré, que ces transferts sont structurellement similaires aux deux précédents (sections 4.2 et 4.3), et pour cette raison, nous choisissons de ne pas détailler l'ensemble des deux études (pour éviter toute redondance) en ne rappelant que les résultats principaux i.e. leurs formulations intégrales et variables aléatoires associées.

4.4.1 Tentative pour $h_F(T)$ en convection thermique

Nous nous intéressons à la résolution par Monte-Carlo de l'équation conducto-convective non-linéaire suivante,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T = -\text{div}(-\lambda \vec{\nabla} T) & , \quad \vec{x} \in \Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \partial_{\vec{n}} T_b = h_F(T_b)(T_F - T_b) & , \quad \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ T(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \quad \vec{x} \in \Omega \end{cases} \quad (4.56)$$

où la masse volumique ρ , la capacité calorifique C , la conductivité λ peuvent être hétérogènes, mais indépendants de la température. Le coefficient de convection h_F dépend de la température de bord que l'on note T_b , T_I est la condition initiale au temps t_I , T_F la température du fluide, Ω le domaine solide, \vec{n} la normale sortante au point $\vec{y} \in \partial\Omega$. Dans cette configuration, les transferts de chaleur sont la conduction à l'intérieur du solide Ω supposé opaque et la convection à l'interface entre le solide et le fluide à travers la couche limite. Comme expliqué dans la section précédente, nous remplaçons le modèle de conduction par le modèle approché suivant, où seul le transfert par conduction est dégradé,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t \tilde{T} = \lambda \left(\frac{2n \mathbb{E}_{\vec{U}}(\tilde{T}_{\vec{U}}) - 2n \tilde{T}}{\delta^2} \right) & , \quad \vec{x} \in \Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\tilde{T}_\delta - \tilde{T}_b}{\delta} = h_F(\tilde{T}_b)(T_F - \tilde{T}_b) & , \quad \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ \tilde{T}(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \quad \vec{x} \in \Omega \end{cases} \quad (4.57)$$

où le pas $\delta \equiv \delta(\vec{x}, \vec{u})$ est défini dans la section 3.4.3.1, $\tilde{T}_\delta(\vec{y}, t) = \tilde{T}(\vec{y} - \delta \vec{n}, t)$ avec \vec{n} la normale sortante de Ω , $\tilde{T}_{\vec{u}} \equiv \tilde{T}_{\vec{u}}(\vec{x}, t) = \tilde{T}(\vec{x} + \delta \vec{u}, t)$, S^{n-1} est la sphère en dimension n et \vec{U} est une variable aléatoire de loi uniforme sur S^{n-1} .

A ce stade, il est essentiel de constater que les modèles de convection non-linéaire (4.57) et radiatif non-linéaire (4.46) sont structurellement semblables : les transferts par conduction à l'intérieur du domaine solide de ces deux modèles sont strictement équivalents, et concernant la condition de bord (i.e. l'égalité du flux), elle ne diffère que du fait que le coefficient d'échange convectif h_F (du modèle (4.57)) est linéaire en \tilde{T}_b alors que le coefficient d'échange radiatif h_R (du modèle (4.46)) est polynomial d'ordre trois en $(\tilde{T}_b, \tilde{T}_\gamma)$, tous deux pilotant entièrement la non-linéarité de ces deux transferts de chaleur. Par conséquent, et même si ces deux types de transferts sont physiquement différents, le travail de résolution réalisé lors de l'étude du transfert radiatif non-linéaire est directement transposable à ce cas d'étude et nous choisissons donc de ne donner que le résultat essentiel, qui est l'expression intégrale de la température de bord :

$$\tilde{T}_b = p_F(\tilde{T}_b)T_F + p_\delta\tilde{T}_\delta + p_b(\tilde{T}_b)\tilde{T}_b, \quad \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty] \quad (4.58)$$

soit

$$\tilde{T}_b = \mathbb{E}_{\Theta_b}(\Theta_b) \quad (4.59)$$

solution de l'équation (4.57) où

$$\Theta_b = \mathcal{B}(p_\delta)\Theta_\delta + (1 - \mathcal{B}(p_\delta))\mathcal{B}(p_F(\Theta_b))T_F + (1 - \mathcal{B}(p_\delta))(1 - \mathcal{B}(p_F(\Theta_b)))\Theta_b \quad (4.60)$$

où

- $p_\delta = \lambda/\delta\hat{k}$, $p_F = h(\tilde{T}_b)/\hat{k}$, $p_b = k_n/\hat{k}$ sont trois probabilités avec $\hat{k} = \lambda/\delta + h(\tilde{T}_b) + k_n$ un majorant uniforme de $\lambda/\delta + h(\tilde{T}_b)$,
- $\tilde{T}_\delta(\vec{y}, t) = \tilde{T}(\vec{y} - \delta\vec{u}, t)$,
- $\Theta_\delta(\vec{y}, t) = \Theta(\vec{y} - \delta\vec{n}, t)$,
- \mathcal{B} suit une loi de Bernoulli de paramètre constant ou aléatoire,
- la fonction $p_F : (T) \in [T_{min}, T_{max}] \mapsto h(T)/\hat{k}$ prenant donc ses valeurs dans $[0, 1]$ et pouvant être interprétée comme une probabilité.

L'algorithme d'échantillonnage de Θ_b est décrit dans l'Algorithme 24-25. Nous aboutissons une nouvelle fois à l'impasse rencontrée lors de l'étude du transfert radiatif non-linéaire : la probabilité p_F n'est pas connue car elle dépend de la température de bord, l'algorithme est branchant, et chaque échantillonnage de Θ_b générant une infinité de branches si

- l'écart de température $T_{max} - T_{min}$ est grand,
- et que la probabilité p_δ est petite,

de telle sorte qu'une branche génère en moyenne plus d'une branche ! En conclusion, l'algorithme est inexploitable au même sens que l'Algorithme 25.

4.4.2 Tentative pour $C(T)$ en conduction thermique

Nous nous intéressons à la résolution par Monte-Carlo de l'équation conductive non-linéaire suivante,

$$\begin{cases} \rho C(T)\partial_t \tilde{T} = -\text{div}(-\lambda \vec{\nabla} T) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ \tilde{T}(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (4.61)$$

où ρ est la densité volumique uniforme, $C(T)$ la capacité calorifique dépendante de la température, λ la conductivité uniforme et T_I la condition initiale à l'instant t_I . Comme

expliqué dans la section précédente, nous remplaçons le modèle de conduction par le modèle approché suivant,

$$\begin{cases} \rho C(T) \partial_t \tilde{T} = \lambda \left(\frac{2n \mathbb{E}_{\vec{U}} (\tilde{T}_{\vec{U}}) - 2n \tilde{T}}{\delta^2} \right) & , (t, \vec{x}) \in]t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ \tilde{T}(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) & , \vec{x} \in \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (4.62)$$

où δ le paramètre de discrétisation, n la dimension du problème, $\tilde{T}_{\vec{u}} \equiv \tilde{T}_{\vec{u}}(\vec{x}, t) = \tilde{T}(\vec{x} + \delta \vec{u}, t)$ et \vec{U} est une variable aléatoire de loi uniforme sur la sphère S^{n-1} . En factorisant le terme $(\tilde{T} - \mathbb{E}_{\vec{U}}(\tilde{T}_{\vec{U}}))$ dans l'équation (4.62) on obtient,

$$\partial_t \tilde{T} = -k(T) (\tilde{T} - \mathbb{E}_{\vec{U}}(\tilde{T}_{\vec{U}})) \quad (4.63)$$

où $k(T) = 2n\lambda/\delta^2\rho C(T)$, qui est de structure équivalente à l'équation (4.30) de la synthèse. Pour cette raison, nous choisissons de laisser le détail technique des calculs dans l'Annexe 5.17, pour ne donner que le résultat essentiel qui est l'expression intégrale de la température,

$$\tilde{T}(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) \left(\begin{array}{l} p(\tilde{T}) \int_{S^{n-1}} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \tilde{T}_{\vec{u}}(\vec{x}, t - \tau) \\ + (1 - p(\tilde{T})) \tilde{T}(\vec{x}, t - \tau) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (4.64)$$

soit

$$\tilde{T} = \mathbb{E}_{\Theta}(\Theta) \quad (4.65)$$

solution de l'Eq. (4.62) où

$$\Theta(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{T}) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{T}) \left(\begin{array}{l} \mathcal{B}(p(\Theta)) \Theta(\vec{x} + \delta \vec{U}, t - \mathcal{T}) \\ + (1 - \mathcal{B}(p(\Theta))) \Theta(\vec{x}, t - \mathcal{T}) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (4.66)$$

où

- $p(T) = k(T)/\hat{k}$ avec \hat{k} est un majorant constant de k ,
- \mathcal{T} une loi exponentielle de paramètre \hat{k} ,
- $\mathcal{B}(P)$ suit une loi de Bernoulli de paramètre aléatoire P ,

L'algorithme d'échantillonnage de Θ est décrit dans l'Algorithme 26. Nous aboutissons ici à la même impasse que celles rencontrées lors de l'étude du transfert par conduction avec une conductivité dépendante de la température : la probabilité p n'est pas connue car elle dépend de la température, l'Algorithme 26 est branchant, chaque collision générant une branche. En conclusion, cet Algorithme 26 est exploitable au même sens que les Algorithmes 17 et 18 i.e. n'est praticable qu'à grand Knudsen (peu de collisions), l'approximation de T par \tilde{T} n'étant valable qu'à petit Knudsen, là où le nombre de branches générées explose, l'algorithme étant inexploitable à cette limite.

4.5 Conclusion : Vers une méthode approchée

A ce stade, pour chacun des problèmes de transferts thermiques non-linéaire que nous avons étudiés, nous avons réussi à les faire rentrer dans le cadre de MC Non-Linéaire : équation (4.34) (section 4.2) pour la conduction avec une conductivité dépendante de la température, équation (4.45) (section 4.3) pour le rayonnement entre surfaces opaques grises, équation (4.56) (section 4.4.1) pour une condition à la limite conducto-convective avec un coefficient d'échange convectif dépendant de la température et équation (4.61) (section 4.4.2) pour la conduction avec une capacité calorifique dépendante de la température.

On retrouve alors la conclusion explicitée dans la synthèse que l'on redit dans le cadre spécifique à la thermique, cadre qui sera pour nous le point de départ des travaux présentés dans le prochain chapitre : si dans chacune de ces équations on choisit de laisser de côté la dépendance spatiale, alors chacune d'entre elles est similaire à l'équation (4.30) et elles rentrent dans le cadre général propre à la thermique suivant,

$$T(t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) \left(\begin{array}{cc} p(T) & S \\ +(1 - p(T)) & T \end{array} \right)_{|t-\tau} \end{array} \right) \quad (4.67)$$

soit

$$T = \mathbb{E}_{\Theta}(\Theta) \quad (4.68)$$

solution de

$$\begin{cases} \frac{dT}{dt} = -k(T)(T - S) \\ T(t_I) = T_I \end{cases} \quad (4.69)$$

où

$$\Theta(t) = \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{T}) T_I \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{T}) \left(\mathcal{B}(P_M(\vec{\Theta}_M)) S + (1 - \mathcal{B}(P_M(\vec{\Theta}_M))) \Theta \right)_{|t-\mathcal{T}} \end{array} \right) \quad (4.70)$$

où

- T_I est la température initiale à l'instant t_I ,
- S est une source supposée connue (elle sera construite de façon récursive lorsque nous réintroduirons la spatialisation),
- la fonction $k : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}_+$ est une fonction bornée majorée par \hat{k} , admettant le développement en série entière autour d'une température de référence T_{ref} : $k(T) = \sum_{m=0}^{+\infty} a_m (T - T_{ref})^m$,
- la fonction $p : T \in [T_{min}, T_{max}] \mapsto k(T)/\hat{k}$,
- $(p_m)_{m \in \mathbb{N}}$ est une suite réelle à valeurs strictement positives vérifiant $\sum_{m=0}^{+\infty} p_m = 1$,
- M la variable aléatoire prenant la valeur $m \in \mathbb{N}$ avec la probabilité p_m ,
- $\vec{\Theta}_m = (\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_m)$ est un vecteur aléatoire constitué par m variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées suivant Θ ,
- $\forall nm \in \mathbb{N}$, $P_m : \vec{\theta}_m \in [T_{min}, T_{max}]^m \mapsto (a_m/p_m) \prod_{i=0}^m (\theta_i - T_{ref})/\hat{k}$ prenant ses valeurs dans $[0, 1]$ (selon la valeur de \hat{k} , de T_{ref} et des coefficients (a_m) !) et pouvant être interprétée comme une probabilité,

- $\mathcal{B}(P)$ suit une loi de Bernoulli de paramètre aléatoire P ,
- \mathcal{T} suit une loi exponentielle de paramètre \hat{k} .

L'algorithme d'échantillonnage de Θ est décrit dans l'Algorithme 21.

Algorithme 21 : Fonction $F_{\Theta}(t)$ d'échantillonnage récursif de Θ au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = y_I$ ou $w = S(t')$), sinon il est reporté dans un appel récursif de F_{Θ} au temps t' .

```

1 Échantillonner  $\tau$  suivant une loi exponentielle  $\mathcal{T}$  de paramètre  $\hat{k}$ ;
2  $t' = t - \tau$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = T_I$ ;
5 else
6   | Échantillonner  $m$  suivant  $M$ ;
7   |  $\theta_i = F_{\Theta}(t')$ , pour  $i \in \{1, 2, \dots, m\}$  (génération de  $m$  branches);
8   |  $p_m = P_m(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$ ;
9   | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
10  | if  $r < p_m$  then
11  |   |  $w = S(t')$ ;
12  |   else
13  |     |  $\theta = F_{\Theta}(t')$ ;
14  |     |  $w = \theta$ ;

```

Nous avons identifié des difficultés associées aux branchements lors de la mise en œuvre de l'Algorithme 21 dans les différents problèmes de transferts thermiques non-linéaire à petit Knudsen : ces problèmes se résument aux mêmes problèmes que ceux rencontrés par G. Terrée (voir section 4.1.3).

Dans le chapitre suivant, nous allons partir de ce cadre général (Eq. (4.67)), en laissant volontairement de côté la spatialisation, pour isoler, mieux comprendre et parvenir à appréhender concrètement le comportement non-linéaire de nos systèmes d'étude, avec comme idée centrale de proposer une stratégie de contournement des difficultés associées aux branchements, quitte à perdre l'exactitude. Nous verrons que cette stratégie sera ensuite directement transposable aux problèmes spatialisés : il n'y aura aucune étape théorique supplémentaire nécessaire à la mise en œuvre de cette stratégie dans des configurations industrielles telles que celles présentées dans la section 3.1, allant de l'étude du transfert de chaleur dans un milieu poreux (Fig. 3.2) au dimensionnement d'une centrale solaire (Fig. 3.4), chaque configuration pouvant mettre en jeu des transferts de chaleur par conduction, convection et rayonnement couplés, incluant les non-linéarités, sans aucune dégradation de la géométrie aussi complexe soit-elle.

Chapitre 5

Thermique Non-Linéaire : Algorithme à Collision nulle et Picard

Nous avons montré au chapitre 4, que pour chacun de nos problèmes de thermique non-linéaire, il était possible de concevoir des algorithmes de MCNL, sans essaim, donc préservant la possibilité d'une étude locale et de l'emploi des techniques récentes de l'informatique graphique, de façon à rendre les temps de calcul insensibles à la complexité géométrique. Cependant, cette insensibilité n'est qu'une propriété purement théorique puisque les temps de calcul et les besoins mémoire sont impraticables même sur des géométries très simples. Nos algorithmes sont branchants, ce qui en tant que tel n'est pas un souci, mais ici qu'il s'agisse

- de la conduction, où notre approche mésoscopique impose un grand nombre de collisions, chaque collision créant une nouvelle branche,
- ou du rayonnement, où chaque intersection d'un chemin avec une interface donne nécessairement naissance à 6 nouveaux chemins,

le nombre de branches nécessaires devient rapidement très élevé. Nous avons ensuite laissé de côté la spatialisation dans le but de synthétiser ces difficultés dans une seule équation différentielle ordinaire (4.69). Dans ce chapitre, nous concentrons notre travail sur cette équation afin de proposer une solution, qui puisse être ensuite directement transposée à l'ensemble des transferts non-linéaires (notamment en reprenant en compte la spatialisation).

Nos premières tentatives essayaient bien sûr de préserver le caractère exact de MC, mais toutes ont abouti à des impasses : explosion du nombre de branches, impraticabilité en géométrie complexe et impossibilité de couplage avec les différents transferts (voir Chapitre 6). Nous avons finalement exploré une solution qui consiste à perdre cette exactitude afin de limiter le nombre de branchements (i.e limiter la profondeur de l'arbre) en élaborant une suite de fonctions (T_n) convergeant vers la solution T : pour estimer T_n , le nombre de branches emboîtées maximal sera de $n - 1$, ainsi

- le MC associé à T_1 est non branchant,
- le MC associé à T_2 génère des branches associées à T_1 , la profondeur maximale de l'arbre est de 1,
- le MC associé à T_n génère des branches associées à T_{n-1} , la profondeur maximale de l'arbre est de $n - 1$.

L'idée est alors d'estimer par MC un élément T_n , choisi de telle sorte qu'il soit une approximation acceptable de la solution recherchée T .

Cette suite (T_n) est élaborée¹ à partir de la méthode de Picard dont le principe est présenté dans la section 5.1 sur l'équation différentielle ordinaire (4.69). Nous établissons ensuite un MC récursif associé à chaque élément de la suite T_n (section 5.1.3). Une fois ces deux étapes accomplies, nous reproduirons la spatialisation dans le but de s'attaquer à la résolution des différents transferts thermiques non-linéaires sur lesquels nous avons concentré notre étude. La mise en œuvre sera immédiate et aucune difficulté supplémentaire ne sera rencontrée. Les résultats obtenus sont présentés dans les deux sections 5.2.1 et 5.3.3.1.

5.1 La méthode de Picard

5.1.1 Présentation de la méthode de Picard

La méthode de Picard aussi appelée méthode des approximations successives peut être employée pour résoudre des équations différentielles ordinaires, des équations aux dérivées partielles et même des équations intégrales. Elle consiste à générer une suite itérative convergente dont la limite est la solution du problème.

Pour illustrer le principe de cette méthode, nous reprenons le cadre général établi à la fin du chapitre précédent. Dans ce cadre là (où nous laissons de côté la dépendance spatiale), chaque équation intégrale associée à un transfert thermique non-linéaire est similaire à l'équation différentielle ordinaire du premier ordre (4.69),

$$\begin{cases} \frac{dT}{dt} = -k(T)(T - S) \\ T(t_I) = T_I \end{cases} \quad (4.69)$$

où T est une fonction de la variable $t \in \mathbb{R}$, $k(T)$ est une fonction positive à valeurs réelles, S une source supposée connue (par exemple une température radiative) et T_I la condition initiale à l'instant t_I . Rappelons à ce stade que ce problème rentre dans le cadre d'étude proposé par G. Terrée, dont une mise en œuvre sur un exemple similaire, est proposée dans [20]. Malheureusement, et comme mentionné au chapitre précédent, sa proposition n'est pas suffisante pour répondre à notre question : elle consiste à générer une branche à chaque collision et n'est efficace que dans des situations à faible épaisseur optique, ce qui n'est pas le cas dans nos situations où le nombre moyen de collisions par réalisation est très élevé (voir les quatre impasses présentées au chapitre précédent). C'est finalement pour éviter cette explosion du nombre de branches que nous avons envisagé une méthode approchée dans le but de contrôler les branchements.

La méthode de Picard consiste alors à itérer l'Eq. (4.69) afin de générer une suite d'approximations $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de T : Pour construire cette suite (T_n) , on commence par se donner

1. La suite, décrite dans le cadre de la méthode de Picard, repose sur les trois points suivants dont les deux premiers ont déjà été travaillés dans les chapitres précédents :

- l'interprétation du coefficient d'extinction k comme un terme collisionnel variable (dépendant de la grandeur recherchée), ce caractère variable pouvant être pris en compte, sans approximation, via la technique des ACN,
- constater que la non-linéarité est entièrement pilotée par ce coefficient d'extinction k : la linéarisation du problème autour de T_{ref} revient simplement à remplacer la fonction $k(T)$ par la constante $k(T_{ref})$,
- et finalement remplacer le terme collisionnel par un terme approché grâce à une approche de type Picard.

un profil T_0 appelé initialisation, que l'on choisit généralement aussi proche² que possible de la solution T . Ensuite, on définit T_1 comme la solution de l'Eq. (4.69) où l'on remplace T par T_0 dans le second membre. De la même façon, on définit T_2 comme la solution de l'Eq. (4.69) où l'on remplace T par T_1 dans le second membre et ainsi de suite. La suite d'approximations $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ ainsi définie est solution du système d'équations différentielles couplées de taille infinie suivant,

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \begin{cases} \frac{dT_n}{dt} = -k(T_{n-1})(T_{n-1} - S), & t \in [t_I, +\infty[\\ T_n = T_I, & t = t_I \end{cases} \quad (5.1)$$

où T_0 est choisi arbitrairement. Formellement, elle est définie comme $T_{n+1} = F_P(T_n)$ où

$$F_P : E \longrightarrow E \\ \tilde{T} \longrightarrow T \text{ tel que } \begin{cases} \frac{dT}{dt} = -k(\tilde{T})(\tilde{T} - S), & t \in [t_I, +\infty[\\ T = T_I, & t = t_I \end{cases} \quad (5.2)$$

où E est l'espace vectoriel des fonctions continues une fois dérivables muni d'une norme.

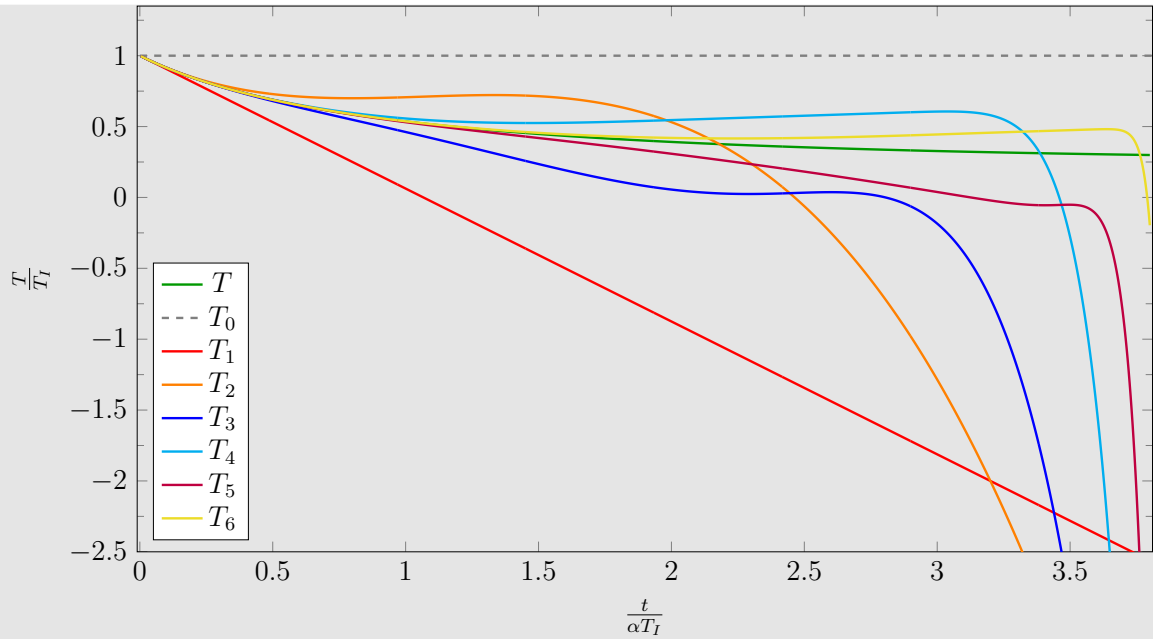
Rappelons que sous les bonnes hypothèses, cette suite est une suite convergente, dont la limite est l'unique solution T de l'Eq. (4.69). Cette propriété de convergence est établie par le Théorème de Cauchy-Lipschitz dont une démonstration repose sur le Théorème de point fixe de Banach/Picard [88].

Dans l'encadré suivant, nous proposons un premier exemple de mise en œuvre de la méthode de Picard :

Mise en œuvre de la **méthode de Picard** pour $k(T) = \alpha(T+S)$ ce qui conduit à $dT/dt = -\alpha(T^2 - S^2)$ dont la solution analytique est $T(t) = S(T_I + S \tanh(St))/(S + T_I \tanh(St))$ avec $T = S$ au stationnaire.

Voici une illustration des six premières itérations obtenues à partir de la méthode de Picard,

2. Dans la pratique, lorsque le champ de T est complexe, le profil T_0 est choisi uniforme égal à la température de référence que l'on note T_{ref} . Avec ce choix, nous verrons que l'ordre un T_1 n'est rien d'autre que la solution linéarisée autour de T_{ref} .



où nous avons choisi $S = T_I/4$ et $T_0 = T_I$. Sur cet exemple, on observe que la suite (T_n) converge rapidement vers la solution T de l'Eq. (4.69) à temps court, mais qu'à temps long la vitesse de convergence est très lente, la convergence n'étant même pas garantie.

Dans cet exemple on constate une mauvaise propriété de la suite (T_n) : la vitesse de convergence vers la solution est très lente en particulier à temps long. Il devient donc nécessaire de mettre en place une nouvelle stratégie.

5.1.2 ACN et Méthode de Picard

Pour remédier à ce mauvais comportement, nous allons élaborer une version modifiée de la méthode de Picard. Cette version modifiée tire bénéfice de la forme particulière de l'équation différentielle que nous considérons, résultant du travail de formalisation du chapitre précédent à partir de la méthode des algorithmes à collisions nulles (ACN), la fonction k pouvant être interprétée comme un terme collisionnel³ et la non-linéarité se résumant au fait que k dépend de T . Nous choisissons de partir de la stratégie de Picard, i.e. commencer par remplacer T dans le second membre par une valeur approchée T_0 , mais nous n'effectuons ce remplacement que dans le coefficient d'extinction k . Physiquement, cela revient à remplacer le coefficient d'extinction $k(T)$ par un coefficient d'extinction approché $k(T_0)$ connu. Il devient possible d'échantillonner les collisions suivant ce coefficient d'extinction approché $k(T_0)$, comme dans la physique du transport linéaire, mais en contre-partie les collisions ainsi échantillonnées ne sont plus en adéquation avec la physique du modèle, d'où un premier niveau d'approximation.

A l'issue de cette procédure, on obtient un champ de température T_1 solution de $dT_1/dt = -k(T_0)(T_1 - S)$ qui, on l'espère, est une meilleure approximation de T que T_0 . Il devient alors possible de réemployer cette même stratégie en remplaçant T_0 par T_1 et ainsi construire un autre champ de température T_2 solution de $dT_2/dt = -k(T_1)(T_2 - S)$. Finalement, en itérant cette procédure on obtient une variante de la méthode de Picard, appelée ici méthode de Picard modifiée, décrite ci-dessous :

3. la situation étant similaire à celle rencontré par G. Terrée, voir sec. 4.1.3

Méthode de Picard modifiée : La méthode de Picard modifiée consiste à reprendre la méthode de Picard, remplacer l'opérateur F_P par un nouvel opérateur noté F , puis construire la suite d'approximations $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ telles que $T_{n+1} = F(T_n)$ où F est défini tel que :

$$F : E \longrightarrow E$$

$$\tilde{T} \longrightarrow T \text{ tel que } \begin{cases} \frac{dT}{dt} = -k(\tilde{T})(T - S), & t \in [t_I, +\infty[\\ T = T_I, & t = t_I \end{cases} \quad (5.3)$$

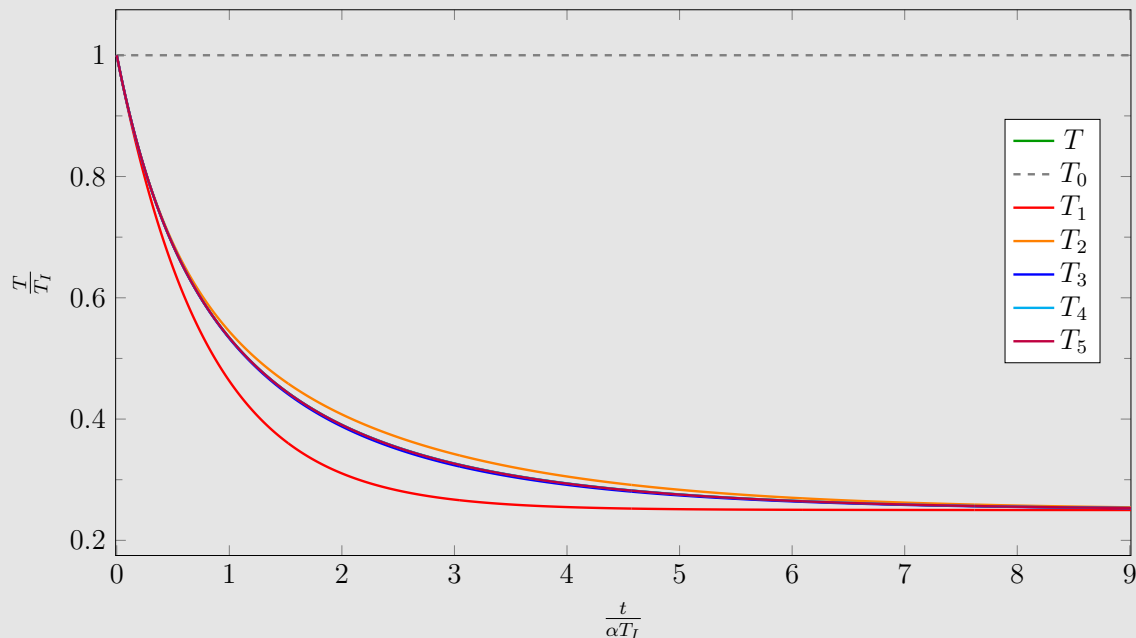
où E est l'espace vectoriel des fonctions continues une fois dérivables muni d'une norme et T_0 est choisi arbitrairement. Autrement dit, la suite de fonctions $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est solution du système différentiel couplé de taille infinie suivant,

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \begin{cases} \frac{dT_n}{dt} = -k(T_{n-1})(T_n - S), & t \in [t_I, +\infty[\\ T_n = T_I, & t = t_I \end{cases} \quad (5.4)$$

Nous reprenons la configuration présentée précédemment et appliquons la méthode de Picard modifiée :

Mise en oeuvre de la **méthode de Picard modifiée** pour $k(T) = \alpha(T+S)$ ce qui conduit à $dT/dt = -\alpha(T^2 - S^2)$ dont la solution est $T(t) = S(T_I + S \tanh(St))/(S + T_I \tanh(St))$ avec $T = S$ au stationnaire.

Voici une illustration des cinq premières itérations obtenues à partir de la méthode de Picard modifiée,



où nous avons choisi $S = T_I/4$ et $T_0 = T_I$. On constate alors que la suite (T_n) est convergente, de limite la solution T de l'équation (4.69), et que même pour des temps longs, la vitesse de convergence est rapide.

L'idée est alors d'évaluer par Monte-Carlo une estimation d'un élément de la suite T_n que l'on aura choisi de telle sorte qu'il soit une bonne approximation de la solution recherchée T , par exemple ici T_3 qui est déjà une bonne approximation de T .

Cette fois-ci, la vitesse de convergence de la suite générée à partir de la méthode de Picard modifiée est rapide (l'itération T_3 étant une bonne approximation de T) et elle converge à temps long. Nous n'avons pas justifié théoriquement cette convergence mais l'avons constaté sur l'ensemble des configurations étudiées, elle reste une tâche importante à réaliser pour la généralisation possible et les applications à d'autres domaines.

Il devient alors intéressant d'envisager la possibilité d'élaborer un MC permettant d'estimer un élément de la suite T_n . Dans la suite du manuscrit, nous continuerons, pour plus de commodité, à appeler méthode de Picard cette version modifiée de la méthode.

5.1.3 Monte-Carlo et Méthode de Picard : MCP

A ce stade, nous proposons un algorithme de Monte-Carlo associé à chaque élément de la suite, appelé Monte-Carlo Picard (MCP). Cet algorithme est élaboré en s'inspirant de la stratégie établie dans la section 4.5, en commençant par exprimer T_n sous une formulation intégrale via la technique des algorithmes à collisions nulles (ACN) dont nous rappelons rapidement les différentes étapes :

$$\begin{aligned}
\frac{dT_n}{dt} &= -k(T_{n-1})(T_n - S) \\
&= -k(T_{n-1})(T_n - S) - (\hat{k} - k(T_{n-1}))T_n + (\hat{k} - k(T_{n-1}))T_n \\
&= -\hat{k}T_n + (\hat{k} - k(T_{n-1}))T_n + k(T_{n-1})S \\
&= -\hat{k} \left(T_n - \left(\left(1 - \frac{k(T_{n-1})}{\hat{k}} \right) T_n + \frac{k(T_{n-1})}{\hat{k}} S \right) \right)
\end{aligned} \tag{5.5}$$

où \hat{k} est un majorant de k .

En résolvant cette équation différentielle d'ordre un où l'on considère le terme $\left(\left(1 - k(T_{n-1})/\hat{k} \right) T_n + \left(k(T_{n-1})/\hat{k} \right) S \right)$ comme une source, on obtient l'expression de T_n sous une formulation intégrale :

$$T_n(t) = \int_0^{+\infty} p_T(\tau) d\tau \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) \left(\begin{array}{cc} p(T_{n-1}) & S \\ +(1 - p(T_{n-1})) & T_n \end{array} \right)_{|t-\tau} \end{array} \right) \tag{5.6}$$

soit

$$T_n = \mathbb{E}_{\Theta_n}(\Theta_n) \tag{5.7}$$

solution de

$$\begin{cases} \frac{dT_n}{dt} = -k(T_{n-1})(T_n - S) \\ T_n(t_I) = T_I \end{cases} \tag{4.69}$$

où

$$\Theta_n(t) = \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{T}) T_I \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{T}) \left(\begin{array}{c} \mathcal{B}(P_M(\vec{\Theta}_{n-1,M}(t - \mathcal{T}))) S(t - \mathcal{T}) \\ + (1 - \mathcal{B}(P_M(\vec{\Theta}_{n-1,M}(t - \mathcal{T})))) \Theta_n(t - \mathcal{T}) \end{array} \right) \end{array} \right) \tag{5.8}$$

où

- T_0 est connue,
- T_I est la condition initiale à l'instant t_I ,
- \mathcal{T} suit une loi exponentielle de paramètre \hat{k} .
- S est une source supposée connue (elle sera construite de façon récursive lorsque nous réintroduirons la spatialisation),
- la fonction $k : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}_+$ est une fonction bornée majorée par \hat{k} , admettant le développement en série entière autour d'une température de référence T_{ref} : $k(T) = \sum_{m=0}^{+\infty} a_m (T - T_{ref})^m$,
- la fonction $p : T \in [T_{min}, T_{max}] \mapsto k(T)/\hat{k}$,
- $(p_m)_{m \in \mathbb{N}}$ est une suite réelle à valeurs strictement positives vérifiant $\sum_{m=0}^{+\infty} p_m = 1$,
- M la variable aléatoire prenant la valeur $m \in \mathbb{N}$ avec la probabilité p_m ,
- $\vec{\Theta}_{n,m} = (\Theta_{n,1}, \Theta_{n,2}, \dots, \Theta_{n,m})$ est un vecteur aléatoire constitué de m variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées suivant Θ_n ,
- $\forall m \in \mathbb{N}, P_m : \vec{\theta}_{n,m} \in [T_{min}, T_{max}]^m \mapsto (a_m/p_m) \prod_{i=0}^m (\theta_{n,i} - T_{ref}) / \hat{k}$ prenant ses valeurs dans $[0, 1]$ (selon la valeur de \hat{k} , de T_{ref} et des coefficients (a_m) !) et pouvant être interprétée comme une probabilité,
- $\mathcal{B}(P)$ suit une loi de Bernoulli de paramètre aléatoire P ,

L'algorithme d'échantillonnage de la variable aléatoire Θ_n associé à T_n (n un entier strictement positif) est décrit dans l'Algorithme 22.

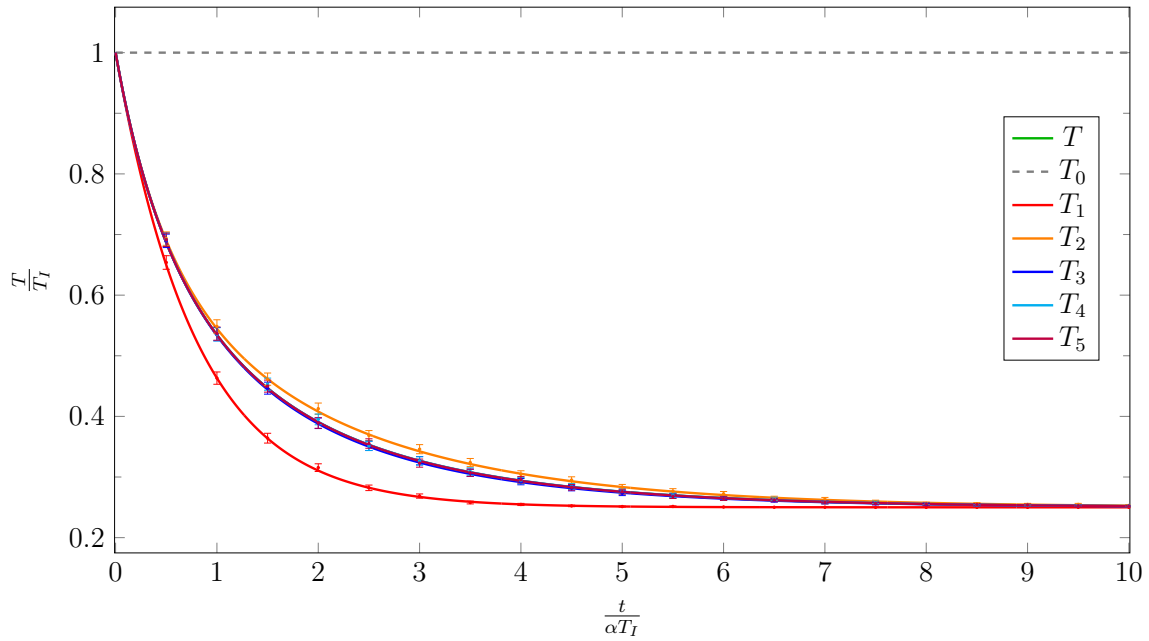
Algorithme 22 : Fonction $F_{\Theta_n}(t)$ d'échantillonnage récursif de Θ_n au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$ ou $w = S(t')$), sinon il est reporté dans un appel récursif de F_{Θ_n} au temps t' .

```

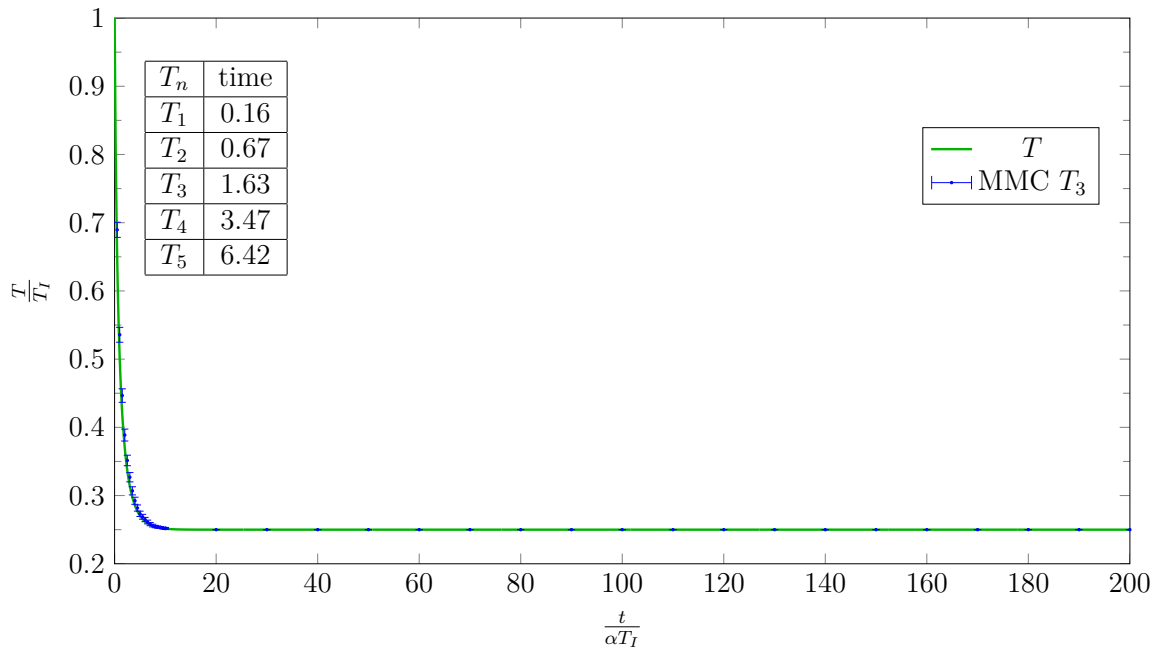
1 Échantillonner  $\tau$  suivant une loi exponentielle  $\mathcal{T}$  de paramètre  $\hat{k}$ ;
2  $t' = t - \tau$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = T_I$ ;
5 else
6   | Échantillonner  $m$  suivant  $M$ ;
7   |  $\theta_i = F_{\Theta_{n-1}}(t')$ , pour  $i \in \{1, 2, \dots, m\}$  (génération de  $m$  branches de l'ordre  $n - 1$ );
8   |  $p_m = P_m(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$ ;
9   | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
10  | if  $r < p_m$  then
11  |   |  $w = S(t')$ ;
12  |   else
13  |     |  $w = F_{\Theta_n}(t')$ ;

```

où Θ_0 est défini à partir de l'initialisation T_0 . Il est fondamental de remarquer à ce stade que cet algorithme est similaire à celui établi dans la synthèse Algorithme 21 page 143 et en particulier qu'ils sont strictement identiques si on choisit $n = +\infty$. A cette limite, on retrouve strictement la proposition de G. Terrée qui consiste à "brancher" à chaque collision.



(a) Résultats MCP pour T_1, T_2, T_3, T_4 et T_5 où nous évaluons vingt estimations représentées sous forme de points avec barres d'erreur.



(b) Résultats MCP pour T_3 à temps long sous forme de points avec barres d'erreur. Temps de calcul pour T_1, T_2, T_3, T_4 et T_5 pour quarante points de mesures et 100000 réalisations.

FIGURE 5.1 – Résultats obtenus à partir de l'Algorithme 22, pour chaque itération T_1, T_2, T_3, T_4 et T_5 sous forme de points avec barres d'erreur. Les courbes en trait plein sont obtenues à partir d'une méthode des différences finies.

Les résultats obtenus à partir de cet algorithme sont présentés dans la Figure 5.1 sous forme de points avec barres d'erreur, où nous avons repris la même configuration que celle présentée précédemment.

Cette illustration confirme le fait que l'Algorithme 22 évalue sans biais chaque élément de la suite et qu'il est possible de réaliser des calculs à temps long ce qui n'était pas envisageable avec la stratégie proposée par G. Terrée i.e à la limite $n \rightarrow \infty$.

A travers les différentes études réalisées durant la thèse, nous avons identifié les deux propriétés fondamentales suivantes :

- Le **choix de l'initialisation** est d'une importance capitale. En pratique, plus l'initialisation sera proche de la solution théorique et plus la méthode de Picard convergera rapidement vers la solution (indépendamment du MC).
- Le **temps de calcul** est une fonction croissante de l'indice de l'itération. En pratique, il sera difficile d'évaluer des itérations élevées, d'où l'importance du choix de l'initialisation.

Nous verrons dans les sections 5.2 et 5.3 qu'ajouter la spatialisation n'entraîne aucune difficulté supplémentaire, l'emploi de la méthode de Picard pour la résolution de transferts thermiques non-linéaires étant immédiat ⁴.

5.2 Transfert thermique par rayonnement sans linéarisation et MCP

A présent nous mettons en oeuvre le MCP pour résoudre l'équation conducto-convecto-radiative non-linéaire (4.45), décrite dans la section 4.3, la température solution étant notée T . La suite d'approximations de Picard $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ solutions du système (5.9) que nous approchons via la suite $(\tilde{T}_n)_{n \in \mathbb{N}}$ solution de l'équation (5.10).

Rappelons que chaque élément de la suite \tilde{T}_n tend vers T_n lorsque le paramètre δ tend vers 0, et que T_n tend vers T lorsque n est grand. Ainsi à condition de choisir δ assez petit, et n assez grand, la température \tilde{T}_n sera une bonne approximation de T .

$$\tilde{T}_n \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} T_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} T$$

L'algorithme d'échantillonnage de Θ_n associé à \tilde{T}_n est décrit dans l'Algorithme 23 (voir Annexe K).

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T_n = -\operatorname{div}(-\lambda \vec{\nabla} T_n) \quad , & \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega}, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \partial_{\vec{n}} T_{b,n} = -\sigma \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma h_R(T_{b,n-1}, T_{\gamma,n-1}) (T_{b,n} - T_{\gamma,n}) + h_F(T_F - T_{b,n}) \quad , & \vec{y} \in \partial\Omega, t \in [t_I, +\infty[\\ T_n(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \quad , & \vec{x} \in \Omega \end{cases} \quad (5.9)$$

4. Pour le transfert par conduction, tout le travail a été réalisé pour un domaine infini et il sera donc nécessaire ultérieurement d'ajouter des frontières et donc un comportement à la limite, et nous verrons que cette étape n'est pas triviale.

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{T}_n(\vec{x}, t) = \int_{S^{n-1}} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\vec{x}' \in \overset{\circ}{\Omega}) \tilde{T}_n \\ + \mathcal{H}(\vec{x}' \in \partial\Omega) \tilde{T}_{b,n} \end{array} \right)_{|(\vec{x}', t-\tau)} \end{array} \right), \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega} \\ t \in [t_I, +\infty] \end{array} \right. \\ \tilde{T}_{b,n} = \int_{\mathcal{D}_{\Gamma}} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma \left(p_{b,n-1} \tilde{T}_{b,n} + p_{\delta} \tilde{T}_{\delta,n} + p_F T_F + p_{R,n-1} \tilde{T}_{\gamma,n} \right), \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{y} \in \partial\Omega \\ t \in [t_I, +\infty] \end{array} \right. \\ \tilde{T}_n(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}) \quad , \quad \vec{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (5.10)$$

où $p_{\delta} = \lambda/\delta\hat{k}$, $p_F = h_F/\hat{k}$, $p_{R,n-1} = h_R(\tilde{T}_{b,n-1}, \tilde{T}_{\gamma,n-1})/\hat{k}$ et $p_{b,n-1} = 1 - p_{R,n-1} - p_{\delta} - p_F$ avec $h_R(\tilde{T}_{b,n-1}, \tilde{T}_{\gamma,n-1}) = \sigma \left(\tilde{T}_{b,n-1}^3 + \tilde{T}_{b,n-1}^2 \tilde{T}_{\gamma,n-1} + \tilde{T}_{b,n-1} \tilde{T}_{\gamma,n-1}^2 + \tilde{T}_{\gamma,n-1}^3 \right)$ et la température \tilde{T}_0 est fixée arbitrairement.

Dans les trois sections suivantes, nous présentons trois résultats obtenus à partir de cet algorithme, premièrement dans une configuration académique appelée Cube, à géométrie convexe, puis dans une configuration appelée double-slab, cette fois-ci à géométrie concave, et enfin dans une géométrie complexe nécessitant une description de type CAO.

5.2.1 Mise en oeuvre sur une configuration académique

5.2.1.1 Description de la configuration académique, Cube

Nous considérons un problème académique de transfert thermique instationnaire avec un solide cubique Ω de frontière $\partial\Omega$, de coté e , de volume $V = e^3$, de surface $S = 6e^2$ placé entre deux parois planes parallèles infinies thermostatées isothermes, notées P_g et P_d que l'on choisit parallèles à deux faces du cube S_g et S_d , les quatre autres faces du cube étant notées S_1 , S_2 , S_3 et S_4 .

Le milieu entre le cube et les deux parois est un fluide transparent isotherme, les couches limites n'étant pas décrites de façon explicite (voir figure 5.2). On note T_I la température du solide à l'instant initial t_I , T_{R_g} et T_{R_d} les températures des deux parois infinies et T_F la température du fluide.

Dans ce problème, les transferts de chaleur sont :

- la conduction thermique à l'intérieur du cube, dont la conductivité thermique λ , la masse volumique ρ , la capacité massique C sont uniformes (indépendantes de la température),
- la convection à l'interface entre le cube et le fluide (à travers les couches limites), le coefficient d'échange convectif h_F étant uniforme sur la surface du cube (indépendant de la température),
- le rayonnement entre les six faces du cube (le matériau constituant le cube étant supposé optiquement opaque) et les deux parois infinies, chacune de ces surfaces étant supposées noires.

Lors de l'analyse détaillée du comportement de l'algorithme, rien ne dépend de façon essentielle⁵ des parties conductive et convective.

5. dans l'Algorithme 23, les probabilités p_{δ} et p_F sont des constantes, indépendantes des températures.

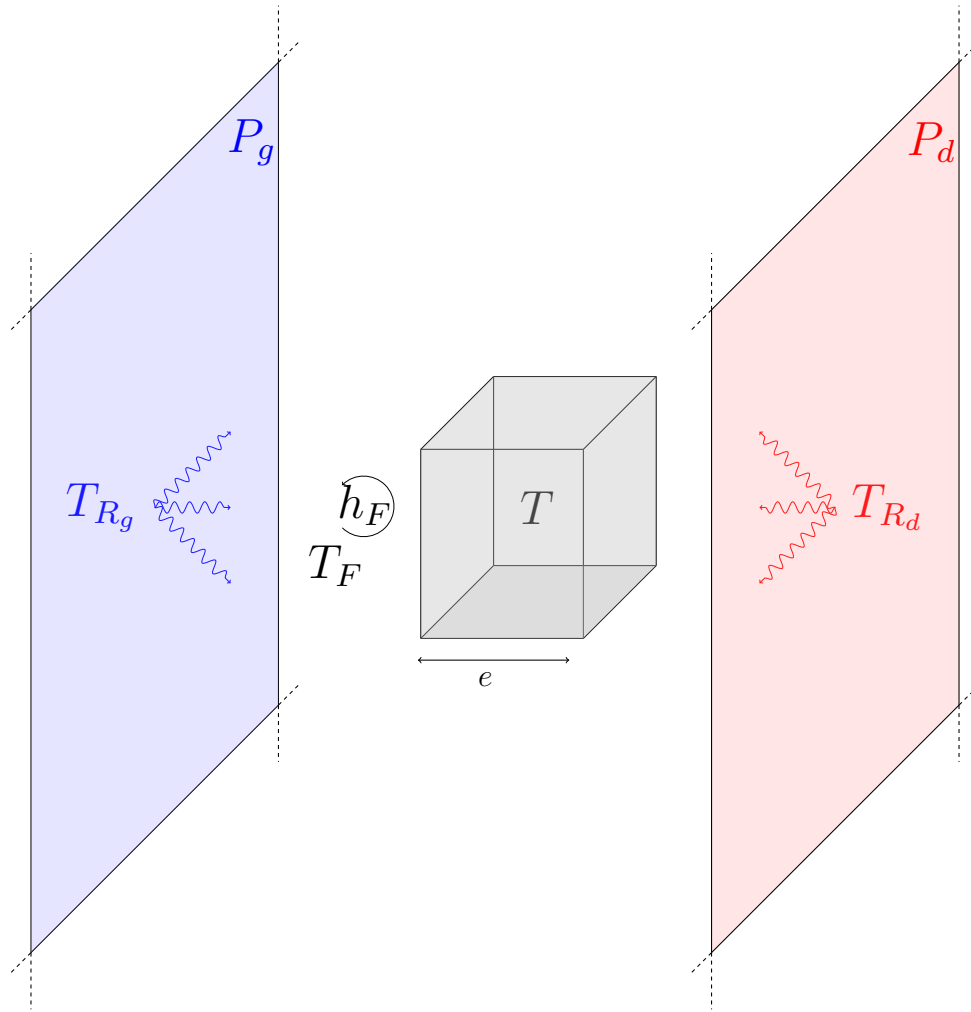


FIGURE 5.2 – Représentation de la configuration Cube avec trois modes de transferts thermiques : la conduction thermique à l’intérieur du cube, la convection à l’interface entre le cube et le fluide (à travers les couches limites) et le rayonnement entre les six parois du cube et les deux parois infinies.

Dans ce qui suit, nous nous plaçons donc aux limites $h_F \rightarrow 0$ et $\lambda \rightarrow +\infty$ c’est-à-dire un corps mince n’échangeant avec son extérieur que par rayonnement. A cette limite, la température du cube T est uniforme, ne dépend que du temps et le modèle de transfert de

Les branches générées le long d’une trajectoire sont seulement dues au transfert par rayonnement. Autrement dit, le nombre de branches moyen généré le long d’une trajectoire est indépendant de la prise en compte des transferts par conduction et convection, ce nombre est seulement piloté par le transfert radiatif qui lui seul est non-linéaire

chaleur résultant se réduit ⁶ à

$$\begin{cases} \rho CV \frac{dT}{dt} = -4S\sigma (T^4 - \mathbb{E}_{\Theta_\Gamma}(\Theta_\Gamma^4)) \\ T(t_I) = T_I \end{cases} \quad (5.11)$$

où $\Theta_\Gamma = \mathcal{B}(1/2)T_{R_g} + (1 - \mathcal{B}(1/2))T_{R_d}$ et $\mathcal{B}(p)$ est une variable aléatoire suivant une loi de Bernoulli de paramètre p .

Dans la première équation, le membre de gauche représente les variations temporelles de l'énergie contenue dans l'ensemble du cube et le membre de droite représente le flux d'énergie associé à l'échange radiatif entre chaque élément de surface du cube et les deux parois thermostatées.

Une mise en œuvre de l'Algorithme 5.3 est présentée dans la Figure 5.3 où nous avons adimensionnalisé le problème en considérant $t/\alpha T_I^3$ avec $\alpha = \sigma/\rho C e$ et en remarquant qu'au stationnaire le problème est entièrement piloté par un seul paramètre $\varsigma = |(T_{R_d}/T_{stat})^4 - (T_{R_g}/T_{stat})^4|/2$ où T_{stat} est la solution stationnaire.

A travers cette Figure, on constate tout l'intérêt de la méthode de Picard : les températures T_2 et T_3 sont estimées par Monte-Carlo sans aucun biais, ces deux températures étant (dans cette configuration) de très bonnes approximations de la température recherchée T , contrairement à la solution linéarisée T_L . Rappelons que contrairement aux prochaines configurations (où nous calculerons \tilde{T}_n), nous pouvons calculer directement l'élément T_n par MCP, car le transfert conductif (et donc le paramètre δ) n'est pas considéré ici.

La méthode proposée, qui reste fidèle à notre façon de concevoir les algorithmes de MC (sans essaim), est une première alternative à la linéarisation du transfert radiatif dans notre communauté.

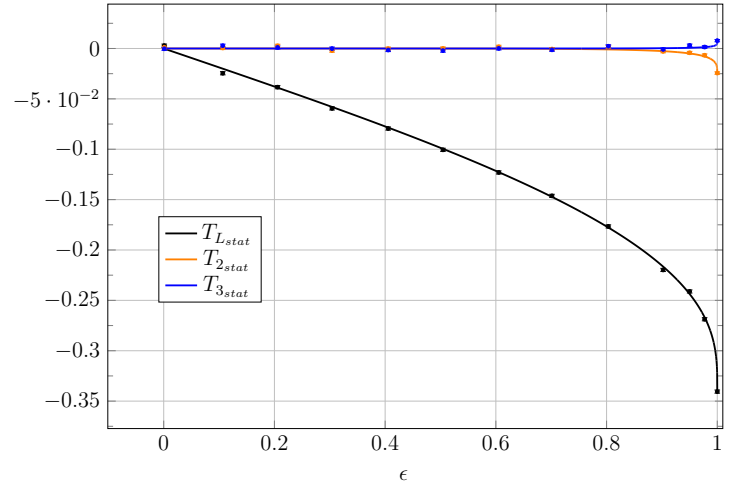
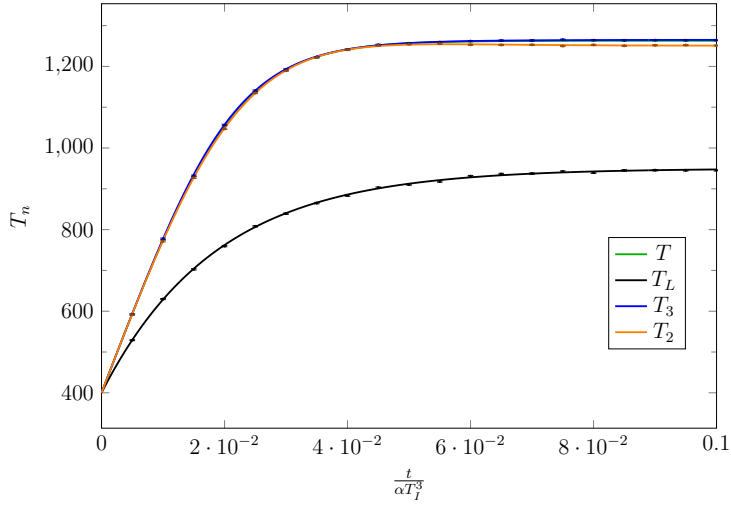
Dans l'Annexe J, nous proposons une étude plus approfondie de ces résultats en rappelant le principe et les conséquences de la linéarisation puis en réalisant une série de résultats concernant le MCP. A l'issue de cette étude, nous avons produit trois illustrations J.3, J.4 et J.5, qui nous ont permis d'identifier les six propriétés suivantes :

- La suite (T_n) converge vers la solution T de l'Eq. (5.11) d'après les figures J.3a, J.4a et J.5a.
- Les estimations de T_n obtenues à partir du MCP (Algorithme 23) sont non biaisées, les courbes en trait plein étant incluses dans les barres d'erreur.
- Le temps de calcul est une fonction croissante de l'itération d'après les tables J.3b, J.4b et J.5b. La prise en compte des transferts par conduction et convection entraînera une augmentation du temps de calcul (le chemin à échantillonner étant plus long), mais en revanche les rapports entre les temps de calcul des différentes itérations seront conservés.

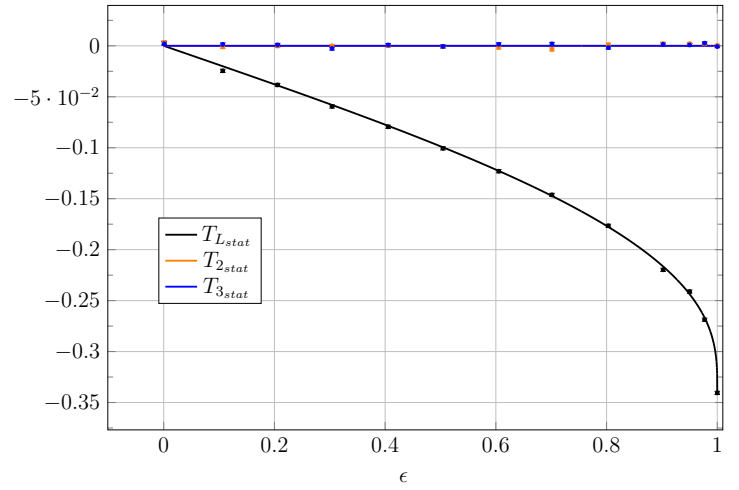
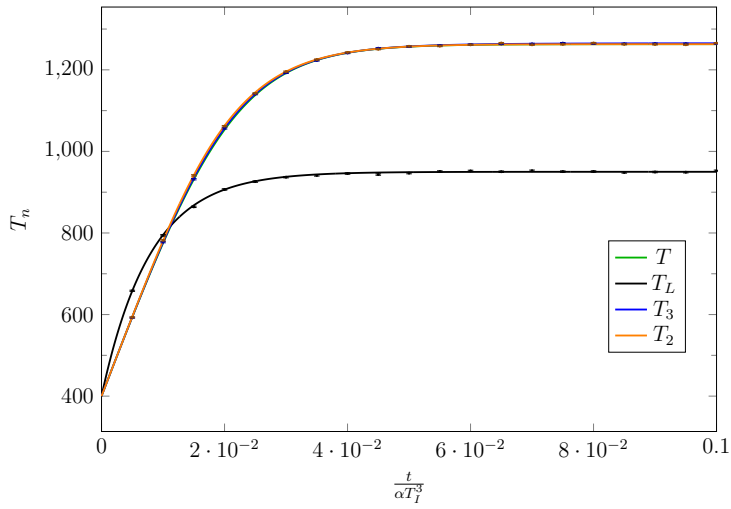
6. Dans la première équation de (5.11), le premier terme représente les variations temporelles de l'énergie contenue dans le cube et le deuxième terme représente les flux d'énergie associés aux six surfaces S_1, S_2, S_3, S_4, S_g et S_d (dont la somme est notée S).

Ces six flux d'énergie sont entièrement déterminés par les températures des deux parois infinies thermostatées, la température du cube et les facteurs de forme entre ces deux parois infinies et les six faces du cube. Pour déterminer ces facteurs de forme, il suffit de constater que les quatre faces orthogonales S_1, S_2, S_3 et S_4 échangent seulement avec les deux parois P_g et P_d dont les facteurs de forme sont de $1/2$ et $1/2$. La surface S_g (resp. S_d) échange seulement avec la paroi P_g (resp. P_d) dont le facteur de forme est égal à un, d'où la factorisation par S .

La deuxième équation représente la condition initiale que l'on impose à la température T_I à l'instant t_I .



(a) $T_{ref} = (T_{R_g} + T_{R_d})/2 = 950K$



(b) $T_{ref} = T_{stat} = 1263K$

FIGURE 5.3 – Résultats obtenus dans la configuration Fig. 5.2, sous l'hypothèse corps mince, avec $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$, $T_I = 400K$, $\Delta T = T_{R_d} - T_{R_g}$ où nous considérons l'initialisation $T_0 = T_{ref}$ pour l'évaluation de T_3 et $T_0(t) = \int_0^{+\infty} p_T(\tau) d\tau (\mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) T_{ref})$ pour l'évaluation de T_2 .

Les courbes en trait plein (obtenues par différences finies) de couleurs respectivement noire, orange et bleue représentent la température (à gauche) et les erreurs relatives (à droite) de T_L , T_2 et T_3 par rapport à l'écart de température en fonction du temps adimensionné $t/\alpha T_I^3$. La température T est solution de l'Eq. (5.11), T_L est solution de l'Eq. (J.1) et les températures T_2 et T_3 sont solution de l'Eq. (J.2), on note T_{stat} , $T_{L,stat}$ et $T_{n,stat}$ les températures stationnaires.

Pour chacune de ces courbes, nous avons employé l'Algorithme 5.17 pour l'évaluation des estimations associées à T_L et l'Algorithme 23 pour celles associées à T_2 et T_3 .

Les temps de calcul pour $N = 100000$ réalisations et vingt points de mesure sont d'environ 0.4s pour la température linéarisée T_L , de 6.5s pour l'itération T_2 et de 12.2s pour l'itération T_3 pour les deux choix de T_{ref} .

- L'itération T_1 est une meilleure approximation de T que T_L , les deux étant des algorithmes non branchants, car issus d'équations linéaires. On remarque que le temps de calcul de T_1 est supérieur à celui de T_L , cette différence est simplement due à l'emploi des collisions nulles.
- Contrairement à la température linéarisée T_L , les solutions stationnaires des itérations (T_n) dépendent du choix de la température de référence (voir Figures J.3 et J.4).
- Les figures J.3a, J.4a et J.5a mettent en évidence que la vitesse de convergence de l'algorithme est pilotée par le choix de l'initialisation.

En résumé, la suite (T_n) est une suite convergente de limite T solution de l'Eq. (5.11), l'itération T_1 est une meilleure approximation de T que T_L , ces deux températures étant issues d'un algorithme de MC linéaire non branchant, la figure J.6 page 304 montre que cette conclusion reste vraie (au stationnaire) quelque soit la valeur du paramètre adimensionnel ς . De plus, quelque soit le choix de l'initialisation, on constate que l'itération T_2 est une approximation de T acceptable !

Dans le prochain paragraphe, nous travaillons toujours sur cette même configuration, mais cette fois-ci en prenant aussi en compte les transferts par conduction (linéaire) et convection (linéaire) que nous avons laissé de côté dans cette première analyse.

5.2.1.2 Configuration académique, avec conduction et convection

Voici un résultat, Figure 5.4, obtenu dans la configuration Cube où l'on considère les trois transferts de chaleur couplés.

En jouant sur les différents paramètres, on retrouve strictement le même comportement que celui présenté dans la section précédente où seul le transfert radiatif était considéré. Ce résultat n'est pas étonnant, car les transferts que nous avons ajoutés sont linéaires :

- La prise en compte de la conduction se traduit algorithmiquement par l'échantillonnage d'un chemin conductif se déplaçant à l'intérieur du cube jusqu'à : soit être absorbé par le fluide, soit être émis en rayonnement depuis la surface du cube. Il ne joue donc aucun rôle particulier concernant la non-linéarité.
- La prise en compte de la convection, quant-à elle, influence la vitesse de convergence de la méthode de Picard. En effet, plus le transfert convectif sera important (par rapport au rayonnement) et plus la non-linéarité, conséquence du transfert radiatif, sera négligeable. Autrement-dit, la prise en compte de la convection ne peut qu'améliorer le comportement de MCP !

Nous avons également constaté que les temps de calcul sont du même ordre de grandeur quelque soit l'itération considérée. Cette propriété est due au choix de la géométrie Cube qui est convexe. Nous verrons dans la prochaine section que ce ne sera plus le cas lorsque la géométrie étudiée est concave.

A travers cet exemple nous avons pu mettre en évidence une propriété très importante de MCP : dans les configurations stationnaires où la température de référence T_{ref} peut être choisi "presque" uniforme, la méthode de MCP permet de déterminer la température solution T seulement avec l'itération 1 qui est élaborée à partir du champ de température T_0 que l'on choisit généralement égal à T_{ref} . Il est alors intéressant de constater qu'au stationnaire T_1 est

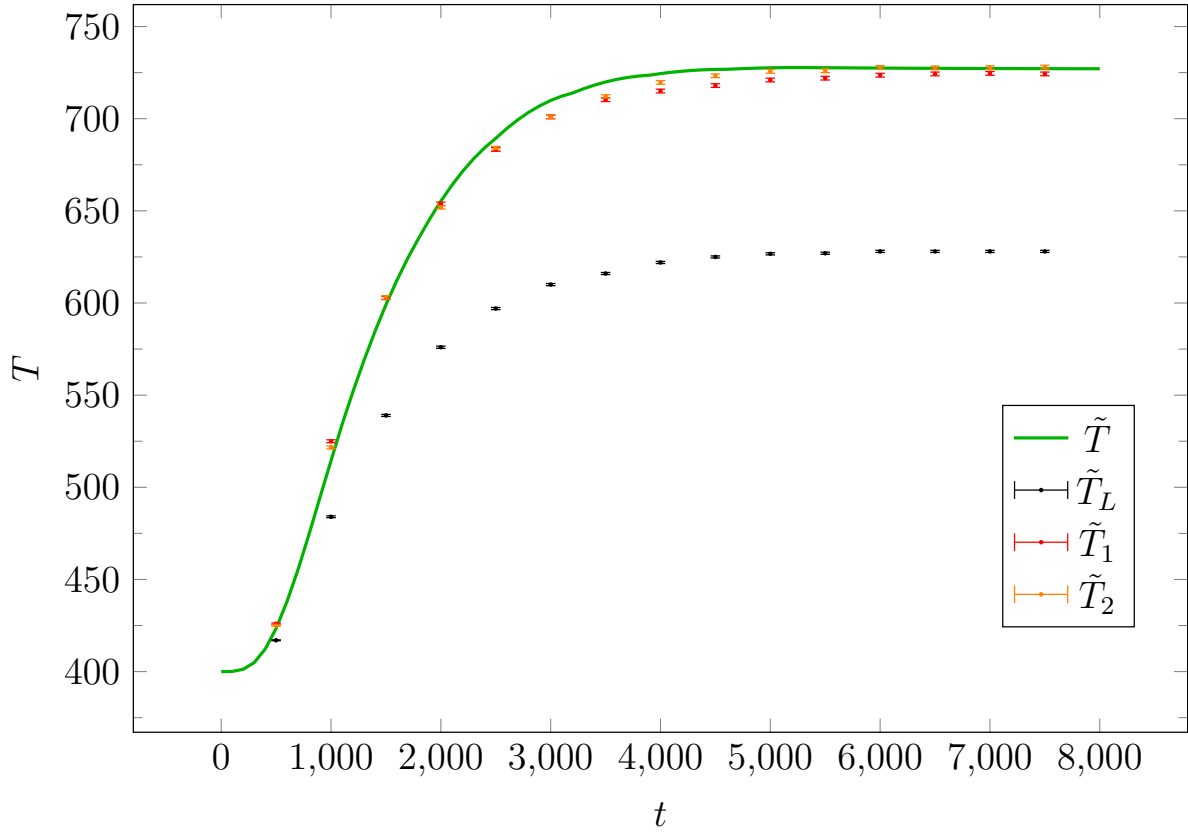


FIGURE 5.4 – Résultats obtenus dans la configuration Cube, en prenant en compte les trois transferts de chaleur conductif, convectif et radiatif. Nous avons choisi de considérer les mêmes paramètres que ceux choisis dans la Figure 5.3 : $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$, $T_I = 400K$. Ensuite nous avons choisi une conductivité $\lambda = 100$, une densité $\rho = 2000$, une capacité calorifique $C = 1000$, un coefficient d'échange convectif uniforme $h_F = 1000$, une température de fluide uniforme $T_F = 600K$ et une température de référence $T_{ref} = 725K$. Le cube considéré ici est d'épaisseur 1 mètre. Les barres d'erreur sont obtenues à partir de l'Algorithme 5.17 pour les estimations associées à \tilde{T}_L et l'Algorithme 23 pour les estimations associées à \tilde{T}_1 et \tilde{T}_2 . La solution \tilde{T} à été obtenue à partir du logiciel Fluent. Les itérations supérieures à deux ne sont pas représentées ici car elles coïncident avec \tilde{T}_2 . Les temps de calcul associées à \tilde{T}_L et \tilde{T}_n sont du même ordre de grandeur quelque soit n (conséquence de la convexité du cube).

égal à T_{ref} si et seulement si $T_{ref} = T$! Il devient donc possible d'envisager une méthode de type itérative, en jouant sur la valeur de la température de référence, jusqu'à déterminer T_{ref} tel que $T_1 = T_{ref}$. Cette propriété de MCP est illustrée dans le tableau 5.5. Rappelons que la température radiative linéarisée \tilde{T}_L est indépendante du choix de T_{ref} et converge vers la température moyenne (suivant les facteurs de forme).

T_{ref}	950	1322	1242	1255
\tilde{T}_1	1322	1242	1255	1255
\tilde{T}_2	1245	1272	1257	1257

FIGURE 5.5 – Résultats obtenus dans la configuration Cube au stationnaire, en prenant en compte seulement les transferts de chaleur radiatif et conductif. Nous avons choisi $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$ et une conductivité $\lambda = 1000$ de telle sorte que la température de référence puisse être choisi uniforme. Les barres d'erreurs associées aux résultats sont d'environ $\sigma = 5K$. Remarquons que la température radiative linéarisée \tilde{T}_L est indépendante du choix de T_{ref} et converge vers la température moyenne i.e $\tilde{T}_L = 950K$.

5.2.2 Mise en œuvre : prise en compte de la récursivité

A travers l'étude de la configuration Cube (Fig. 5.2), nous avons montré que l'algorithme de Monte-Carlo Picard 23 permet d'évaluer une estimation approchée de la solution recherchée, cette estimation pouvant être choisie aussi proche de la solution que souhaité, en jouant sur l'ordre d'itération (T_2 étant généralement suffisante) et la qualité de l'initialisation ?

Nous verrons dans le chapitre 6, section 7.2, qu'il est possible d'éviter cette approximation, en élaborant un algorithme de Monte-Carlo exact obtenu à partir d'une reformulation intégrale astucieuse, qui est efficace dans la configuration Cube. Cependant, nous montrerons que cet algorithme n'est praticable que pour des objets convexes : physiquement, la conséquence de la concavité est que l'objet peut échanger de la chaleur par rayonnement avec lui même, ce qui se traduit algorithmiquement par un échange radiatif avec une température inconnue, entraînant une explosion du nombre de branches. Des explications plus détaillées seront données dans la section correspondante. C'est finalement pour contourner cette difficulté liée à la concavité que la méthode de Picard se révèle la plus pertinente, nous permettant alors de contrôler le nombre de branches emboîtées au prix d'une approximation.

Nous démontrons cette capacité à prendre en compte des géométries concaves à travers l'étude de la configuration Double-Slab.

5.2.2.1 Configuration conducto-convecto-radiative, Double Slab

Nous considérons un problème de transfert thermique instationnaire avec un solide, noté Ω , de frontière $\partial\Omega$, composé de deux murs plans infinis d'épaisseur e , face à face, et entouré de deux parois planes parallèles infinies thermostatées isothermes notées P_g et P_d parallèles aux deux murs. Les milieux entre les deux murs et entre les murs et les deux parois sont des fluides transparents isothermes, les couches limites n'étant pas décrites de façon explicite (voir Figure 5.6). On note T_I la température du solide à l'instant initial t_I , T_{R_g} et T_{R_d} les températures des deux parois infinies et T_F la température du fluide (la même pour les trois parties fluides). La température T_F est imposée pendant l'expérience (enceintes fluides thermostatées). Dans ce problème, les transferts de chaleur sont

- la conduction thermique à l'intérieur du solide (composé de deux murs), dont la conductivité thermique λ , la masse volumique ρ , la capacité massique C sont uniformes (indépendantes de la température),
- la convection à l'interface entre les murs et le fluide (à travers les couches limites), le coefficient d'échange convectif h_F étant uniforme sur toute la surface des deux murs

- (indépendant de la température),
- le rayonnement entre les quatre faces délimitant le solide (le matériau constituant les murs étant supposé opaque) et les deux parois infinies, chacune de ces surfaces étant supposées noires.

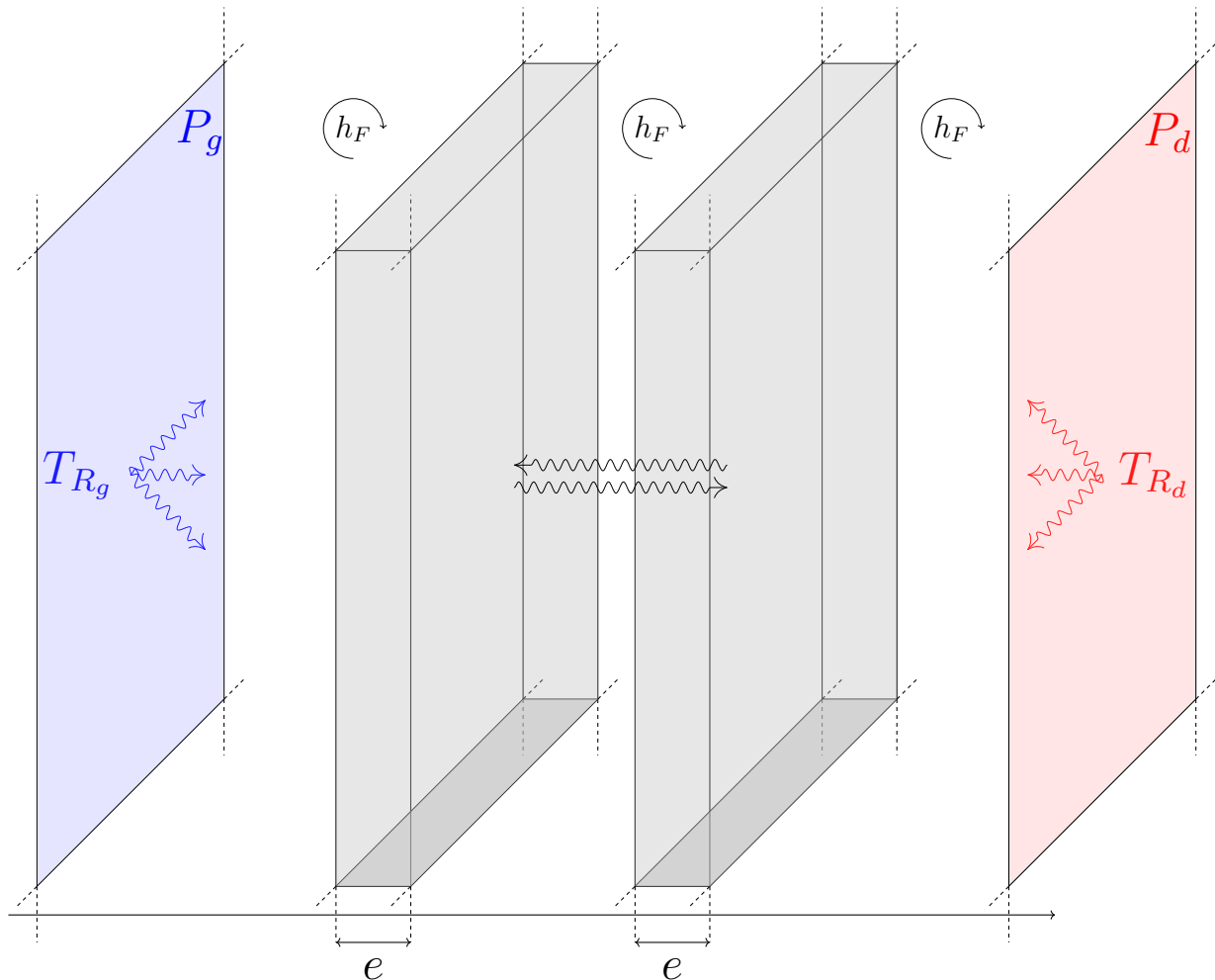


FIGURE 5.6 – Représentation de la configuration Double Slab avec trois modes de transferts thermiques : la conduction thermique à l'intérieur des deux murs, la convection à l'interface entre les murs et le fluide (à travers les couches limites) et le rayonnement entre les quatre parois des deux murs et les deux parois infinies.

5.2.2.2 Étude théorique

Pour mieux comprendre les conséquences de la concavité, nous menons d'abord une étude théorique inspirée de cette configuration de double slab, mais avec le rayonnement comme seul transfert de chaleur, donc sans aucun couplage (les transferts linéaires par conduction et convection ne jouant aucun rôle sur le plan de la non-linéarité). Cette situation (corps mince, sans convection) est finalement équivalente à celle présentée section 5.2.1 équation (5.11), où la température du solide est uniforme et ne dépend que du temps.

Pour représenter le rayonnement entre les parois d'un tel objet concave, et sans avoir recours à une description explicite d'une géométrie (voir Figure 5.7), nous choisissons d'ajouter une récursivité et une variabilité (de la température radiative imposée aux limites) dans le transfert radiatif de façon à mimer le comportement de l'algorithme dans une telle situation : on introduit une source notée $\mathbb{E}_{\Theta_\Gamma}(\Theta_\Gamma^4)$ telle que la v.a. Θ_Γ prend la valeur T avec la probabilité p , T_+ avec la probabilité $(1-p)f_+$ et T_- avec la probabilité $(1-p)f_-$ où $T_\pm = S(1 \pm \varsigma)^{1/4}$.

Ainsi, la récursivité est pilotée par le paramètre p et la variabilité par le paramètre ς . La récursivité signifie que la grandeur T "échange" avec elle-même. La variabilité signifie que la grandeur T "échange" avec deux objets à des températures différentes T_+ et T_- avec les probabilités (facteurs de forme) $(1-p)f_+$ et $(1-p)f_-$ respectivement (pour le reste elle "échange" avec elle-même). Le modèle se réduit alors à

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \partial_t T = -\alpha (T^4 - \mathbb{E}_{\Theta_\Gamma}(\Theta_\Gamma^4)) \\ T(t_I) = T_I \end{array} \right. \\ \theta_\gamma = \begin{cases} T, & \text{avec la probabilité } p \\ S_\gamma, & \text{avec la probabilité } (1-p) \end{cases} \\ S_\gamma = \begin{cases} T_+ = S(1 + \varsigma)^{1/4}, & \text{avec la probabilité } f_+ \\ T_- = S(1 - \varsigma)^{1/4}, & \text{avec la probabilité } f_- \end{cases} \end{array} \right. \quad (5.12)$$

où θ_γ est une réalisation de Θ_Γ , avec l'indice γ une réalisation de la variable aléatoire Γ , α et S des paramètres constants, p et ς des probabilités. En utilisant la stratégie de Picard,

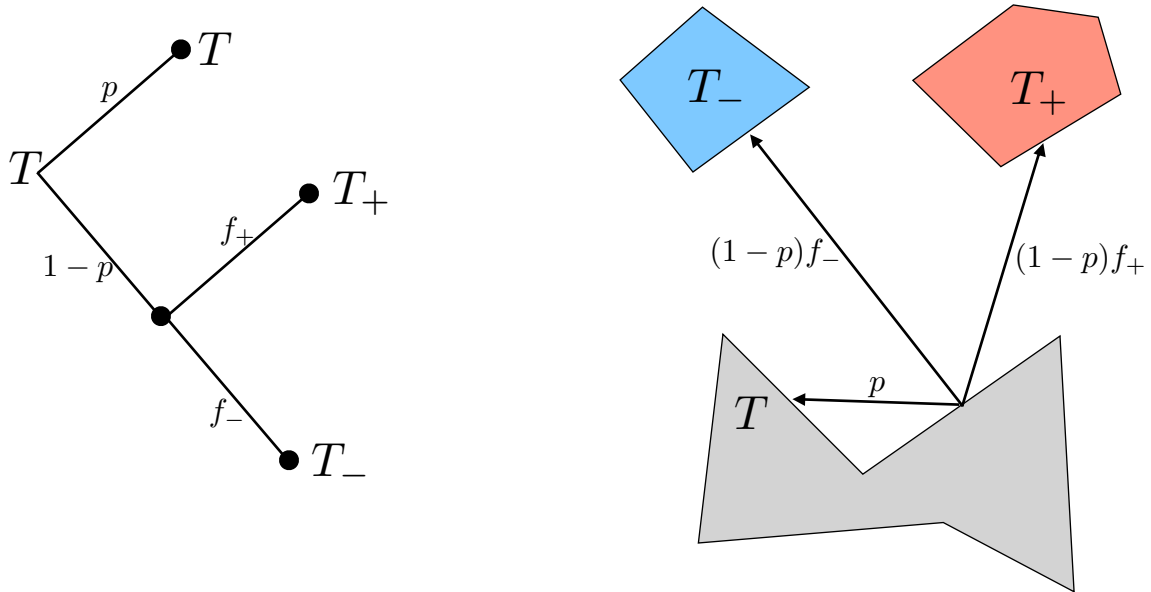


FIGURE 5.7 – Illustrations schématique de la configuration académique étudiée : plus p est proche de 1 et plus le matériau échange par rayonnement avec lui-même, plus ς est proche de 1 et plus l'écart de température $T_+ - T_-$ est important.

présentée dans la section précédente, on obtient une suite d'approximations $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$, que l'on

exprime sous une formulation intégrale de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_n(t) = \int_0^{+\infty} \hat{k} \exp(-\hat{k}s) ds \left(\mathcal{H}(s > t) T_I + \mathcal{H}(s < t) \int_{\mathcal{D}\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(+ \frac{k(T_{n-1}, T_{\gamma, n-1})}{\hat{k}} T_{\gamma, n} + \left(1 - \frac{k(T_{n-1}, T_{\gamma, n-1})}{\hat{k}} \right) T_n \right) \Big|_{t-s} \right) \\ T_0 = T_{ref} \\ T_i(t_I) = T_I, \quad i \in \mathbb{N}^* \end{array} \right. \quad (5.13)$$

où $k(y, x) = \alpha(y^3 + y^2x + yx^2 + x^3)$, \hat{k} est un majorant de k (par exemple $4\alpha T_{max}^3$ avec T_{max} un majorant de T) et T_{ref} est un profil arbitraire (en général choisi uniforme).

Pour adimensionnaliser le problème (en choisissant ici $f_+ = f_- = 1/2$), on considère le changement de variable $t/\alpha T_I^3$, en conséquence, les paramètres adimensionnels sont p , ς et $\psi = \frac{S}{T_I}$. Les résultats obtenus pour différentes valeurs des paramètres (p , ς , ψ) sont présentés dans la Figure 5.8.

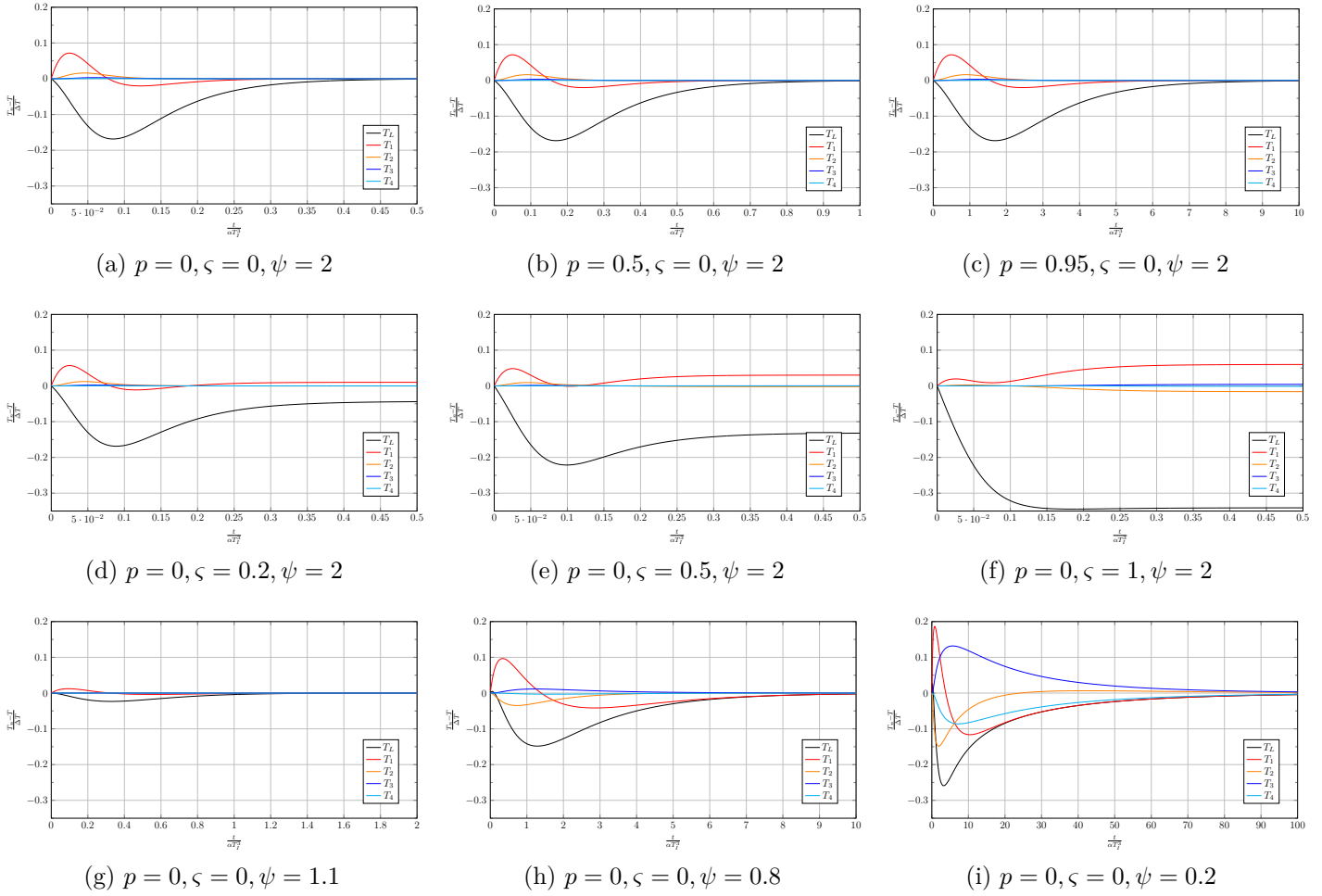
A travers cette figure, on identifie trois cas critiques : 5.8c, 5.8f et 5.8i.

- Dans le cas 5.8c, on constate que la suite (T_n) est convergente vers la solution T , mais qu'en revanche le temps pour atteindre le régime stationnaire est une fonction croissante de p . Ce comportement est facilement interprétable : plus p est grand et plus les échanges radiatifs ont lieu du solide vers lui même, l'inertie du solide augmente (seul le transfert radiatif joue un rôle ici) et par conséquent la dynamique temporelle du solide est plus lente (nous verrons que du point de vue algorithmique du MCP, plus p sera grand et plus les chemins échantillonnés seront longs).
- Dans les deux cas 5.8f et 5.8i, on constate que les problèmes de convergence sont dus au fait que les échanges radiatifs (via la v.a. Γ) ont lieu avec des surfaces dont la valeur de la température imposée est faible. On peut mettre ce phénomène en évidence en jouant sur les facteurs de forme voir Figure 5.9.
- On remarque une dernière caractéristique de la suite dans le cas 5.8i : plus la température radiative imposée aux limites est froide et plus la dynamique temporelle du solide est lente.

Ces difficultés de convergence de la méthode de Picard étant identifiées, nous nous intéressons à présent à l'Algorithme 23 du MCP lui-même. Pour réaliser cette étude, nous visualisons l'influence des différents paramètres adimensionnels sur le temps de calcul, en traçant ce temps en fonction des différents paramètres, pour les trois premières itérations de Picard. Nous proposons également une validation de cet algorithme, ainsi que les temps de calcul associés dans la Figure 5.10.

Voici en six points un résumé des résultats obtenus dans la Figure 5.10 :

- La première limite, triviale, mise en évidence par la Figure 5.10a est due à la récursivité : si p est proche de 1, alors les échanges de chaleur par rayonnement (via la v.a. Γ) se font entre surfaces où la valeur de la température n'y est pas prescrite. D'un point de vue algorithmique, cela se traduit par une récursivité, faisant augmenter le nombre de branches générées le long d'un chemin. Rappelons que si la température est imposée, alors l'algorithme s'arrête, retournant comme poids cette température, et que dans le cas contraire (i.e. température non imposée), l'algorithme continue de manière récursive jusqu'à atteindre une condition aux limites imposée.



ς	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
T_+	600.00	614.47	627.98	640.67	652.65	664.00	674.81	685.12	694.97	704.43	713.52
T_-	600.00	584.40	567.44	548.81	528.06	504.53	477.16	444.05	401.24	337.40	0

(j) Variation des températures $T_+ = S(1 + \varsigma)^{1/4}$ et $T_- = S(1 - \varsigma)^{1/4}$ en fonction du paramètre ς avec $S = 600$ (si $T_I = 300$ alors $\psi = 2$).

ψ	0.2	0.4	0.6	0.8	1	1.2	1.4	1.6	1.8	2
S	60	120	180	240	300	360	420	480	540	600

(k) Variation de la température S en fonction du paramètre $\psi = S/T_I$ avec $T_I = 300$.

FIGURE 5.8 – Résultat de l'influence des paramètres p , ς , ψ pour $T_{ref} = \frac{S+T_I}{2}$ et $f_+ = 0.5$: le paramètre p agit seulement sur la dynamique temporelle de la température, le paramètre ς agit seulement sur la vitesse de convergence de la méthode de Picard et le paramètre ψ agit sur les deux à la fois.

- Toujours sur cette même Figure 5.10a, on observe que les variations des temps de calcul associés aux températures T_L et T_1 en fonction de p sont identiques : c'est une conséquence du fait que ce sont deux algorithmes non branchants. En revanche ce n'est pas le cas pour T_2 qui est branchant et on observe une augmentation du temps de calcul

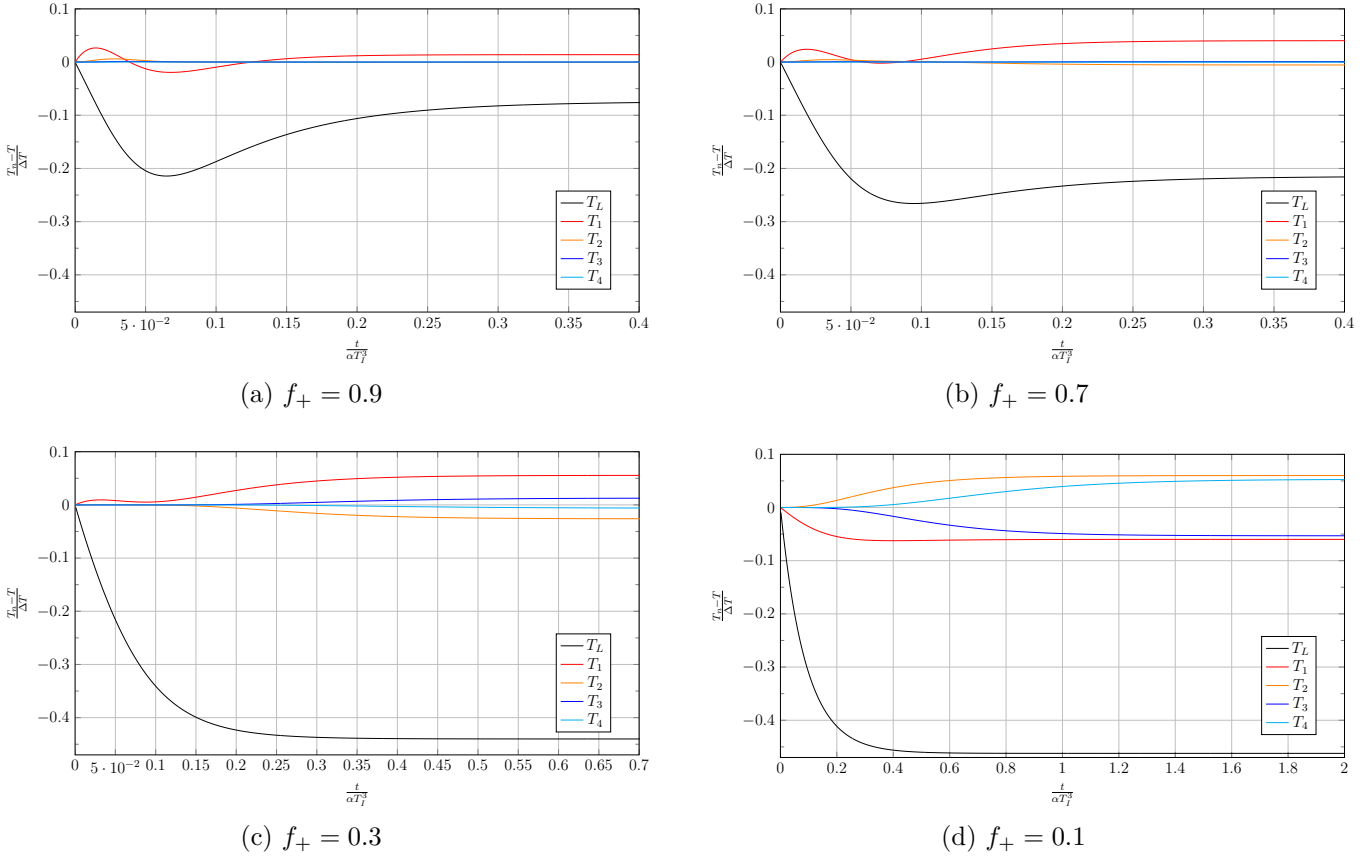
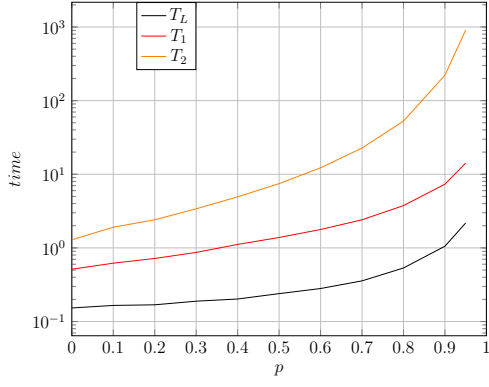


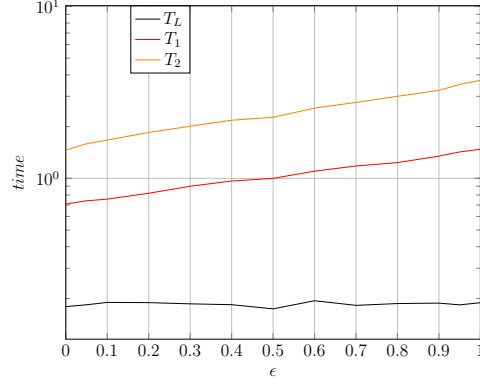
FIGURE 5.9 – Comportement asymétrique en température : Dans cette figure, on montre que plus les échanges radiatifs ont lieu avec des surfaces où la valeur de la température imposée est "faible", plus la méthode de Picard a du mal à converger, et au contraire, lorsque les échanges radiatifs ont lieu avec des surfaces où la valeur de la température imposée est "élevée", plus la méthode de Picard converge rapidement. $y_{ref} = \frac{S+y_I}{2}$, $p = 0$, $\varsigma = 1$ et $\psi = 2$. Plus f_+ est proche de 1, plus la probabilité d'échanger avec T_+ est grande, et plus f_+ est proche de 0, plus la probabilité d'échanger avec T_- est grande. La figure 5.9d identifie un comportement oscillant à temps long de la suite (T_n) autour de la solution, la suite à cette limite (température froide) diverge.

nette lorsque p tend vers 1. *C'est une première limite ($p \rightarrow 1$) de notre algorithme !*

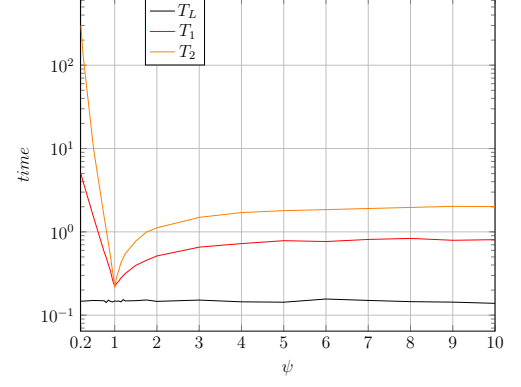
- Dans la Figure 5.10b on observe une insensibilité de T_L au paramètre ς , contrairement aux températures T_1 et T_2 qui en dépendent de façon croissante. Cette dépendance est la conséquence de l'emploi des collisions nulles : lorsque $\varsigma = 0$, le solide échange de la chaleur avec une seule température $S = T_+ = T_- = 600K$ qui est la température maximale du système. Par conséquent, chacune des six branches envoyées ne peuvent retourner que S comme poids de MC (c'est la seule température pouvant être retenue au stationnaire) et l'algorithme est stoppé. En revanche, à l'autre limite $\varsigma = 1$, le solide échange avec deux températures $T_+ = 713.52$ et $T_- = 0$. Dans ce cas une fois sur deux ($f_+ = 1/2$) il échange avec T_+ et une fois sur deux il échange avec T_- . Lorsqu'il échange avec T_- la probabilité de "brancher" est très grande, ce qui est à l'origine de l'augmentation du temps de calcul. *C'est une deuxième limite ($\varsigma \rightarrow 1$) de notre algorithme, qui reste toutefois acceptable !*



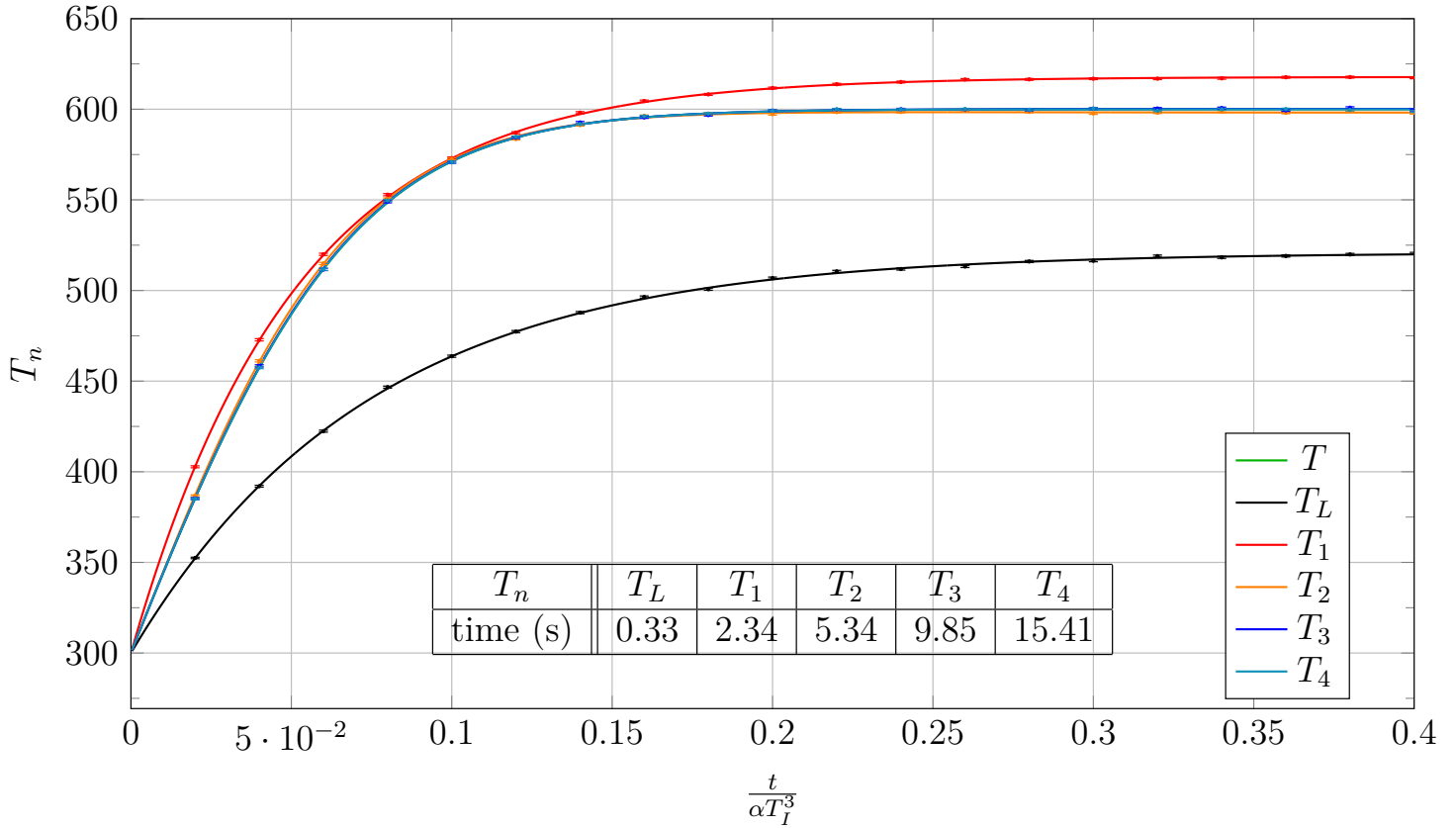
(a) $N = 1000000$, $\zeta = 0$, $\psi = 2$



(b) $N = 1000000$, $p = 0$, $\psi = 2$



(c) $N = 1000000$, $p = 0$, $\zeta = 0$



(d) Evolution temporelle de la température T_n pour les paramètres adimensionnels $p = 0$, $\zeta = 1$, $\psi = 2$, nous avons choisi pour l'illustration $T_I = 300$ et $S = 600$ ($T_+ = 704$, $T_- = 337$).

FIGURE 5.10 – Evolution du temps de calcul en fonction des paramètres p (fig. 5.10a), ζ (fig. 5.10b) et ψ (fig. 5.10c) de l'Algorithme 5.17 au stationnaire. La figure 5.10d représente l'évolution de la température T_n au cours du temps, les temps de calcul correspondants sont donnés dans le tableau pour les vingt estimations. L'ensemble des résultats présentés dans cette figure ont été obtenus en considérant $T_{ref} = \frac{S+T_I}{2}$, $f_+ = 0.5$.

- Dans la Figure 5.10c on commence par observer un optimum du temps de calcul en $\psi = 1$. Ce point correspond finalement au cas critique où $T_I = S$, le problème est trivial, sans aucune variation de température. Dans ce cas ($\psi = 1$ et $p = 0$), il ne peut y avoir

ni collisions nulles ni récursivité et par conséquent les temps de calcul associés à T_L , T_1 , et T_2 devraient être identiques. Cependant, on observe une augmentation pour T_1 et T_2 qui est simplement due au codage lui même qui réalise des tests triviaux (à cette limite) d'où l'augmentation de ce temps de calcul.

- Ensuite, on observe que le temps de calcul est une fonction croissante de ψ sur l'intervalle $[1, +\infty[$. Cette augmentation est une nouvelle fois la conséquence de l'emploi des collisions nulles : lorsque ψ augmente la température S augmente, S étant la seule température pouvant être retournée par notre algorithme (à la limite stationnaire). De plus à la limite ψ tend vers l'infini, on observe une convergence de temps de calcul vers des limites qui sont envisageables pour le calcul en configuration plus complexe.
- En revanche, toujours Figure 5.10c, on montre que le temps de calcul est une fonction décroissante de ψ sur l'intervalle $[0, 1]$. A la limite où $\psi = 0$, on observe une explosion du temps de calcul qui peut se comprendre de la façon suivante : à cette limite $\psi = 0$, la température S est nulle, cette température étant la seule pouvant être retournée par notre algorithme. La conséquence est que la probabilité échantillonnée p_R est forcément nulle et par conséquent le nombre de branches explose ainsi que le temps de calcul. *C'est une troisième limite ($\psi \rightarrow 0$) de notre algorithme !*

Il est intéressant de remarquer que les trois limites $p \rightarrow 1$, $\varsigma \rightarrow 1$ et $\psi \rightarrow 0$ correspondent exactement aux limites rencontrées lors de l'étude de la vitesse de convergence de la méthode de Picard Fig. 5.8.

Il apparaît donc que les configurations où notre algorithme est difficilement praticable (essentiellement par conséquence de l'explosion du nombre de branches générées), correspondent exactement aux configurations où la méthode de Picard converge lentement.

Finalement, deux limites sont vraiment problématiques : $p \rightarrow 1$ qui n'est rien d'autre qu'un phénomène de piégeage⁷ bien identifié dans la littérature, et $\psi \rightarrow 0$ qui est due à la structure de la formulation intégrale Eq. (5.13) : la probabilité d'obtenir une vraie collision est k/\hat{k} , le poids associé étant $T_{\gamma,n}$ et la probabilité d'obtenir une collision nulle est $1 - k/\hat{k}$, le poids associé étant T_n . Comme nous l'avons mentionné précédemment, les probabilités ne sont pas connues à l'avance, il devient donc nécessaire d'échantillonner six réalisations (dont trois potentiellement triviales si $T_{\gamma,n}$ est connue) de la variable aléatoire Θ_b dont les valeurs ne peuvent être rien d'autre qu'une des températures imposées aux conditions aux limites (au stationnaire, les seules températures imposées aux limites sont T_+ et T_-). Nous avons montré que si la valeur des températures échantillonnées est faible (i.e. proche de T_{min}), alors la probabilité d'obtenir une collision nulle est élevée, ce qui entraîne une augmentation du nombre de branches générées. Ce comportement est mis en évidence par la figure 5.10c où l'on remarque qu'il y a une nette augmentation du temps de calcul lorsque $\psi < 1$, ce qui correspond à un refroidissement du système. On en déduit un *comportement asymétrique en température* où l'efficacité de l'Algorithme 5.17 dépend de la valeur des conditions aux limites : *l'algorithme fonctionne bien lorsque l'on chauffe le système et mal lorsqu'on le refroidit.*

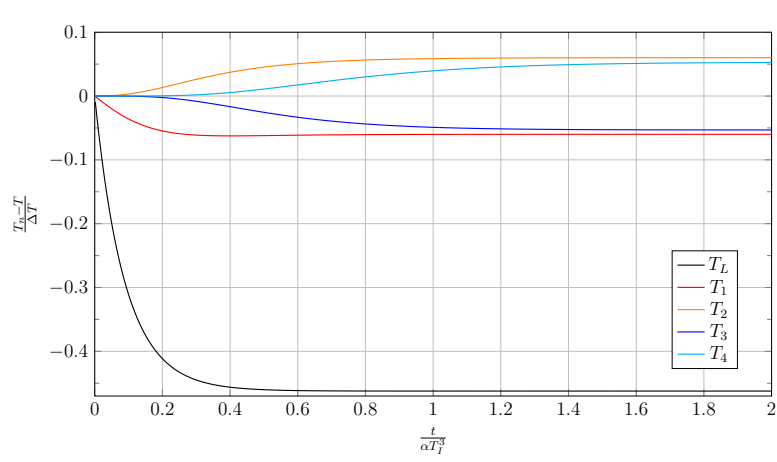
7. ici, la longueur des chemins est d'autant plus grande que p est proche de 1 !

5.2.2.3 Remarque sur la réduction de variance

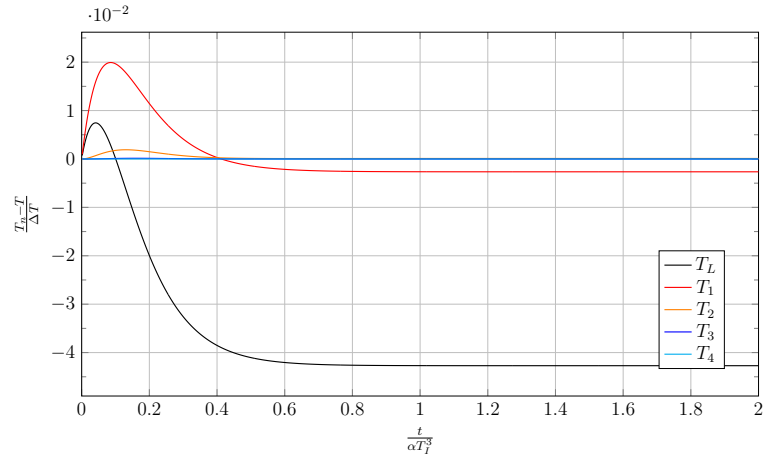
Reprenons la configuration présentée dans la Figure 5.9 où nous avons choisi un facteur de forme $f_+ = 0.1$, les échanges radiatifs se faisant principalement entre surfaces froides, impliquant une vitesse de convergence de la suite T_n vers la température T très lente. Pour remédier à ce mauvais comportement de la méthode de Picard, il devient intéressant d'envisager une stratégie de type réduction de variance (voir section 5.17) : considérons un exemple où l'on suppose connaître la provenance des différentes sources, chaude et froide (penser à la direction en Dirac du soleil), on peut alors jouer sur les densités de probabilité à l'origine des facteurs de forme (dans notre exemple, cela revient à introduire une nouvelle probabilité p_+), pour réduire la variance :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\Theta_r}(\Theta_r^4) &= pT^4 + (1-p) \left(f_+ (T_+)^4 + f_- (T_-)^4 \right) \\ &= pT^4 + (1-p) \left(p_+ \left(T_+ \left(\frac{f_+}{p_+} \right)^{1/4} \right)^4 + p_- \left(T_- \left(\frac{f_-}{p_-} \right)^{1/4} \right)^4 \right) \end{aligned} \quad (5.14)$$

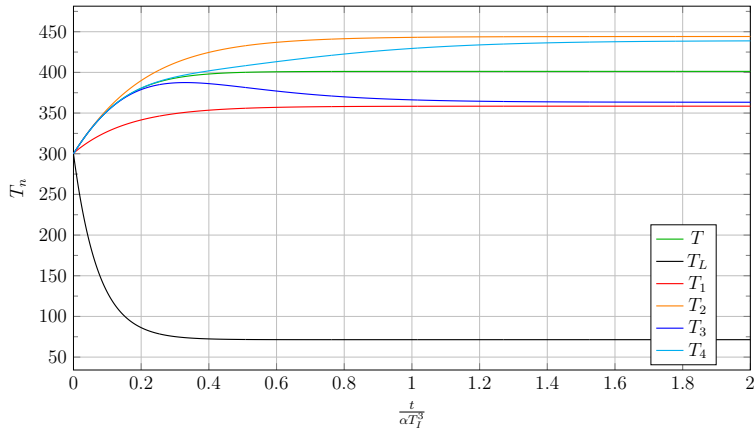
avec $p_+ + p_- = 1$. Comme le montre la Figure 5.11, cette stratégie a de lourde conséquence sur la vitesse de convergence de la méthode de Picard.



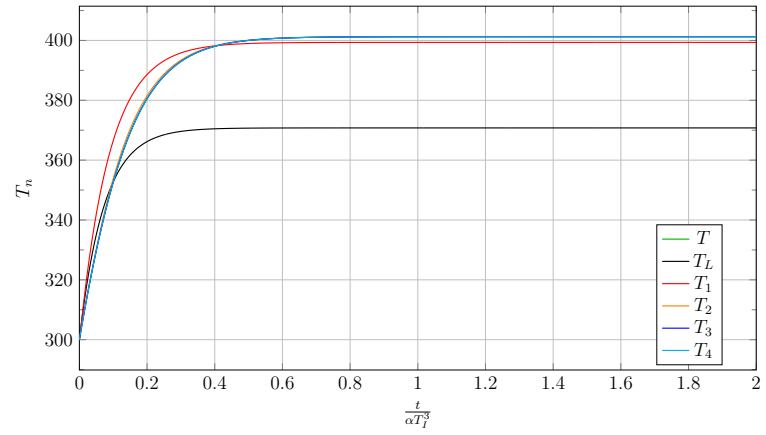
(a) $f_+ = 0.1, p_+ = 0.1$



(b) $f_+ = 0.1, p_+ = 0.9$



(c) $f_+ = 0.1, p_+ = 0.1$



(d) $f_+ = 0.1, p_+ = 0.9$

FIGURE 5.11 – Evolution temporelle de l’erreur relative $(T_n - T_l)/\Delta T$ et de la température T_n pour les paramètres adimensionnels $p = 0, \zeta = 1$ et $\psi = 2$, en utilisant comme température de référence $T_{ref} = \frac{S+T_l}{2}$. Nous illustrons ici le comportement de l’algorithme sans réduction de variance (i.e. avec $p_+ = f_+$) dans la Figure (a) et (c), puis avec réduction de variance (en choisissant $p_+ = 0.9$) dans la Figure (b) et (d). Pour cette illustration nous avons choisi $T_l = 300$ et $S = 600$ ($T_+ = 704, T_- = 337$).

5.2.2.4 Résultats dans le cas conducto-convecto-radiatif

Voici une série de résultats obtenus dans la configuration double-slab (où les trois transferts de chaleur sont considérés), Figure 5.6, où nous avons choisi de présenter des résultats uniquement au stationnaire pour les deux raisons suivantes :

- à cette limite stationnaire la solution analytique est connue,
- et puisque le Knudsen est une fonction décroissante du temps, la non-linéarité la plus compliquée à gérer est toujours située à cette limite.

T_{ref}	407	371	370	time
\tilde{T}_L	371	370	370	22s

T_{ref}	407	397	396	time
\tilde{T}_1	397	396	395	20s

T_{ref}	407	407	407	time
\tilde{T}_2	407	407	407	141s

FIGURE 5.12 – $T_{R_g} = 300$, $T_{R_d} = 515$, $h_F = 0$, $\lambda = 70$, stationnaire, $\sigma \sim 1$ pour tous les résultats présentés, $\delta = 1/20$. Solution analytique $T = 407K$ au milieu du mur de gauche.

T_{ref}	607	486	498	time
\tilde{T}_L	486	498	496	10s

T_{ref}	607	600	602	time
\tilde{T}_1	600	602	602	8s

T_{ref}	607	664	670	time
\tilde{T}_2	664	670	668	180s

T_{ref}	607	645	647	time
\tilde{T}_3	645	647	647	3320s

FIGURE 5.13 – $T_{R_g} = 300$, $T_{R_d} = 915$, $h_F = 0$, $\lambda = 70$, stationnaire, $\sigma \sim 3$ pour tous les résultats présentés, $\delta = 1/20$. Solution analytique $T = 649K$ au milieu du mur de gauche.

T_{ref}	892	631	659	time
\tilde{T}_L	631	659	657	5s

T_{ref}	892	824	845	time
\tilde{T}_1	824	845	844	4.2s

T_{ref}	892	1020	1060	time
\tilde{T}_2	1020	1060	1070	191s

T_{ref}	892	874	870	time
\tilde{T}_3	874	870	870	5705s

FIGURE 5.14 – $T_{R_g} = 303$, $T_{R_d} = 1482$, $h_F = 0$, $\lambda = 70$, stationnaire, $\sigma \sim 6$ pour tous les résultats présentés, $\delta = 1/20$. Solution analytique $T = 935K$ au milieu du mur de gauche.

Ces trois résultats, présentés sous forme de tableau, nous permettent de montrer à nouveau tout l'intérêt et le bon comportement de l'algorithme de Monte-Carlo Picard 23 : la vitesse de convergence est très rapide et l'itération \tilde{T}_1 est une bien meilleure approximation que la température linéarisée \tilde{T}_L .

On retrouve également les limites de MCP : plus l'écart de température est important et plus il devient nécessaire de considérer une itération élevée, et le fait que le temps de calcul est une fonction croissante de l'itération.

Dans la Figure 5.14, on constate qu'il devient nécessaire de considérer une itération supérieure à \tilde{T}_3 pour que l'estimation soit valable : on observe un début d'oscillation de la suite (T_n) autour de la température recherchée T . On se retrouve alors dans une situation similaire à celle rencontrée dans la Figure 5.9d, où la probabilité d'échanger avec les températures chaudes (ici $\tilde{T}_{R,d}$) est faible. Pour éviter ce comportement, il suffit de considérer une initialisation un peu plus "intelligente" en considérant non plus une initialisation uniforme, mais plutôt une initialisation hétérogène qui se rapprocherait de la solution recherchée.

5.2.3 Passage à l'échelle

Les études précédentes nous ont permis de montrer que la prise en compte du couplage du radiatif avec les transferts conductif et convectif ne posent aucune difficulté supplémentaire. Nous montrons ici qu'il en est de même pour la prise en compte d'une géométrie complexe. Rappelons que cette praticabilité est la conséquence de l'emploi d'un intersecteur rayon-triangle développé par la communauté de la synthèse d'image.

Ici, les résultats présentés sont issus d'une stratégie équivalente à celle employée en synthèse d'image : l'idée consiste à estimer par Monte-Carlo la température de radiance en chaque pixel d'un cadre virtuel placé dans la scène, afin de générer une image thermique. Pour évaluer la température de radiance en un pixel, on échantillonne un grand nombre de chemins optique terminant leurs trajectoires : soit à l'infini de la scène (aucune intersection) et dans ce cas on récupère la température de radiance imposée comme poids de MC, soit on atteint une frontière où la température de radiance est imposée et on la récupère comme poids de MC, soit on atteint une frontière où la température de radiance est inconnue et dans ce cas on l'échantillonne, selon le principe de double randomisation, via un chemin conducto-convecto-radiatif (selon l'Algorithme 23), que l'on récupère comme poids de MC.

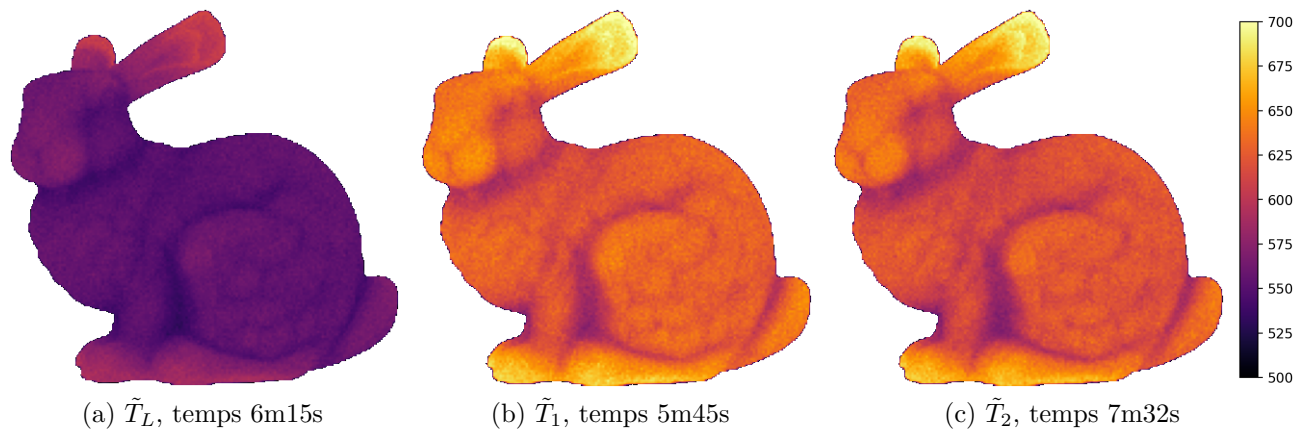


FIGURE 5.15 – Résultats obtenus dans la géométrie Stanford Bunny 1.1a, en prenant en compte les trois transferts de chaleur conductif, convectif et radiatif en instationnaire. Nous avons choisi de considérer une température initiale $T_I = 400K$ et une température radiative environnante uniforme prenant la valeur $400K$ avec le facteur de forme $1/2$, et $1500K$ avec le facteur de forme $1/2$. Ensuite nous avons choisi une conductivité $\lambda = 100$, une densité $\rho = 2000$, une capacité calorifique $C = 1000$, un temps d'observation $t = 1000s$, un coefficient d'échange convectif uniforme $h_F = 1000$, une température de fluide uniforme $T_F = 600K$ et une température de référence $T_{ref} = 725K$. Ces résultats sont obtenus à partir de l'Algorithme disponible dans [89], en considérant 4096 réalisations par pixels. Les barres d'erreur sont de l'ordre de $4K$. Les itérations supérieures à deux ne sont pas présentées ici car elles coïncident avec \tilde{T}_2 .

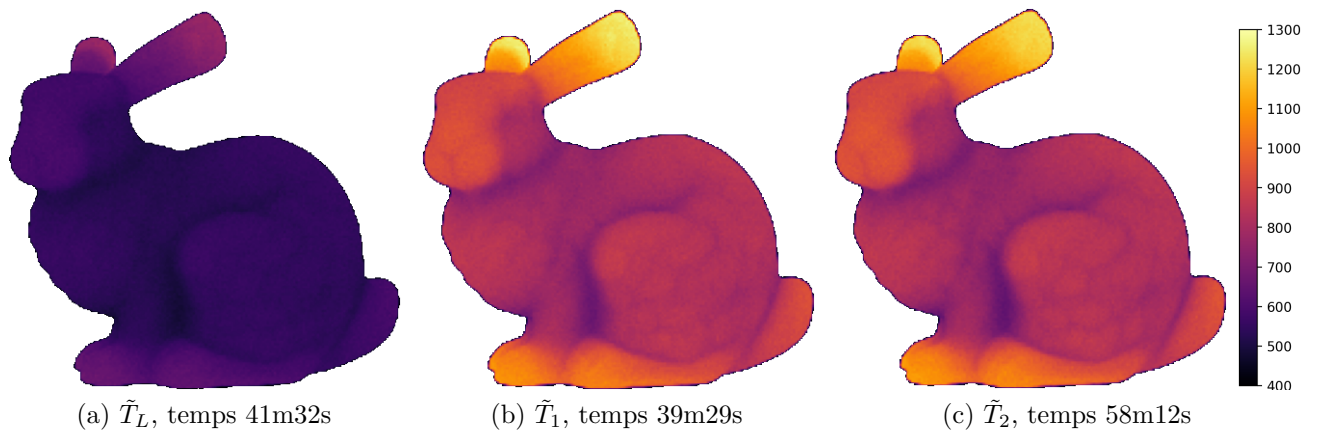


FIGURE 5.16 – Même configuration que dans la Figure 5.15 où nous considérons seulement le couplage conducto-radiatif ($h_F = 0$) et un temps d'observation $t = 250s$.

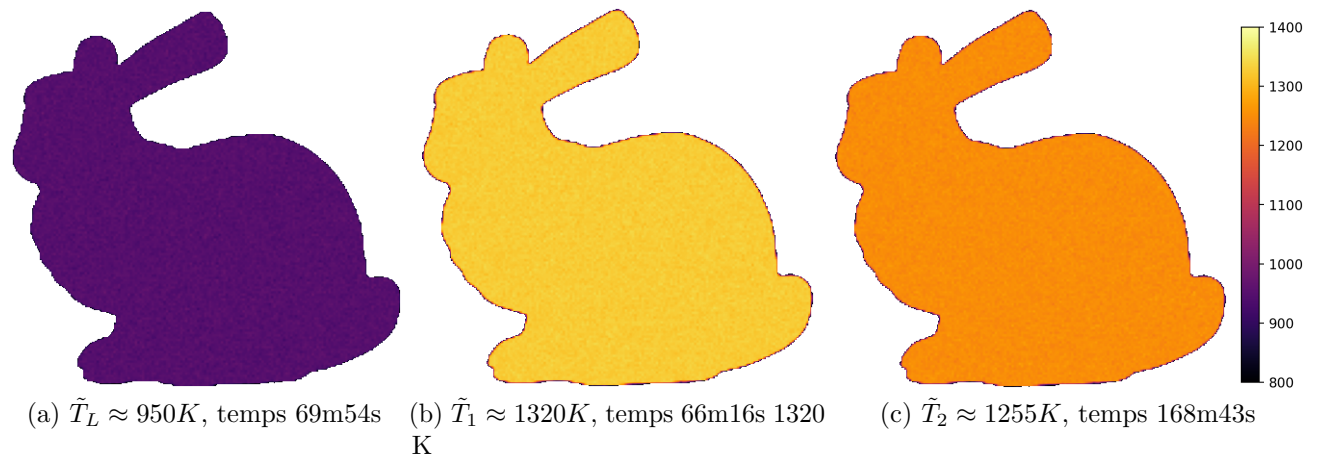


FIGURE 5.17 – Même configuration que dans la Figure 5.16 au stationnaire. La température solution est connue analytiquement : $1263K$.

Ces trois Figures nous permettent de démontrer toute l'efficacité de l'algorithme, notamment la praticabilité en géométrie complexe. On retrouve alors les mêmes comportements que ceux observés dans les figures 5.4 et J.3a que se soit en termes de convergence ou de temps de calcul. Le passage à l'échelle ne pose ici aucune difficulté.

5.3 Transfert thermique par conduction non-linéaire et MCP

A présent, nous mettons en œuvre le MCP pour résoudre l'équation conductive non-linéaire (4.34), décrite dans la section 4.2, la température solution étant notée T . La suite d'approximations notée $(\tilde{T}_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est solution de l'équation (5.16). Rappelons que chaque élément de la suite \tilde{T}_n tend vers T_n lorsque le libre parcours moyen δ_{me} tend vers 0, et que T_n tend vers T lorsque n est grand. Ainsi, à condition de choisir δ_{me} assez petit, et n assez

grand, la température \tilde{T}_n sera une bonne approximation de T .

$$\tilde{T}_n \xrightarrow{\delta_{me} \rightarrow 0} T_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} T$$

L'algorithme d'échantillonnage de Θ_n associé à \tilde{T}_n est décrit dans l'Algorithme 27 (voir Annexe K.4).

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T_n = -\operatorname{div} \left(-\lambda(T_{n-1}) \vec{\nabla} T_n \right) \\ T_n(\cdot, t_I) = T_I \end{cases} \quad (5.15)$$

$$\begin{cases} \tilde{T}_n(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t) \\ f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l') dl' \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - t_{l'}) T_I(\vec{x} - c(t - t_{l'}) \vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - t_{l'}) \left(\begin{array}{l} p(\tilde{T}_{n-1}) \tilde{T}_n \\ + (1 - p(\tilde{T}_{n-1})) f_{\vec{u},n} \end{array} \right)_{|(\vec{x}-l'\vec{u}, t-t_{l'})} \end{array} \right) \end{cases} \quad (5.16)$$

où l'initialisation $\tilde{T}_0 = T_0$ est choisie arbitrairement, \mathcal{L} suit une loi exponentielle de paramètre \hat{k} , $p(T) = k(T)/\hat{k}$ avec $k(T) = c\rho C/d\lambda(T)$ et \hat{k} un majorant constant de k (d étant la dimension spatiale).

Dans la section suivante, nous présentons un résultat obtenu à partir de cet algorithme dans une configuration académique : milieu infini en instationnaire avec un profil de température initial cosinusoidal. La mise en œuvre en géométrie fermée bornée nécessite un travail supplémentaire, car rappelons-le, l'Equation (4.34) est établie en milieu infini et la considération de frontières n'est pas si simple (conséquence de la marche mésoscopique).

En effet, l'algorithme que nous avons élaboré nécessite l'emploi d'une marche mésoscopique⁸ tandis que les conditions de bord sont exprimées en fonction de la grandeur macroscopique i.e la température ! Le travail que représente la mise en œuvre de cette marche en géométrie complexe, notamment la prise en compte des conditions de bord est un travail que nous n'avons qu'effleuré : nous proposons une stratégie embryonnaire, basée sur la proposition de Milnes, dans la section 5.3.2 qui n'a pas été mise en œuvre en géométrie 3D. Pour cette raison et par opposition au travail réalisé en rayonnement, nous concentrons notre travail sur l'étude de la non-linéarité, en ne considérant que des configurations géométriques simples : un mur en dimension un avec une condition de Dirichlet au stationnaire, puis un cube en dimension deux avec une condition de Dirichlet en instationnaire.

5.3.1 Résultats en milieu infini

On considère un problème de transfert thermique instationnaire purement conductif dans un milieu infini de dimension deux. Le modèle de transfert de chaleur est donné par :

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T = -\operatorname{div} \left(-\lambda(T) \vec{\nabla} T \right) & , \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2, t \in [t_I, +\infty[\\ T(\vec{x}, t_I) = T_I & , \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2 \end{cases} \quad (4.34)$$

8. Une des motivations concernant le choix de cette marche mésoscopique était de pouvoir employer les outils issus de la communauté de la synthèse d'image, avec comme vocation d'attaquer la résolution dans des géométries nécessitant une description de type CAO.

et la conductivité par

$$\frac{1}{\lambda(T)} = \frac{1}{\lambda_{ref}} + \beta(T - T_{ref}) \quad (\text{K.2})$$

où l'on considère le paramètre adimensionnel $\alpha = \beta\lambda_{ref}\Delta T/2 = 0.8$ (la conductivité varie du simple au nonuple) et la condition initiale $T_I(x, y) = T_{ref} + A(\cos(2\pi x/\omega_x) \cos(2\pi y/\omega_y))$.

En choisissant ce profil de température initial, et en considérant comme initialisation le champ de température $T_0 \equiv T_{ref}$, on peut établir le champ de température T_1 analytique,

$$T_1(x, y, t) = T_{ref} + A \left(\cos\left(\frac{2\pi x}{\omega_x}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{\omega_y}\right) \right) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (5.17)$$

où $\tau = \rho C / \left(\lambda_{ref} \left((2\pi/\omega_x)^2 + (2\pi/\omega_y)^2 \right) \right)$. Connaissant ce champ de température T_1 , il est alors possible de l'utiliser pour évaluer l'itération T_2 ,

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T_2 = -\text{div} \left(-\lambda(T_1) \vec{\nabla} T_2 \right) & , \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2, t \in [t_I, +\infty[\\ T_2(\vec{x}, t_I) = T_I & , \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2 \end{cases} \quad (5.18)$$

en l'injectant directement dans la probabilité p de l'équation (5.16). On notera $\tilde{T}_{2,inj}$ ce champ de température, ainsi échantillonné (sans branchement, en utilisant directement $p(T_1)$). Cette astuce nous permet de vérifier que remplacer $p(T)$ par une réalisation de sa v.a. associée $p(\Theta)$ à chaque collision n'entraîne aucune différence en termes de variance et de convergence. Ce résultat est présenté dans la Figure 5.18

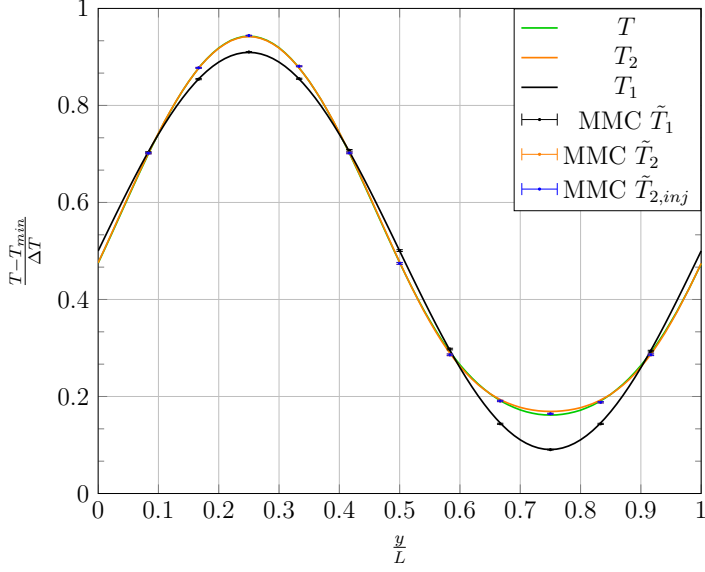
On retrouve alors le fait qu'en injectant directement cette solution T_1 dans p , les temps de calcul sont du même ordre de grandeur que dans le cas linéaire. On remarque même qu'il est plus rapide d'évaluer $\tilde{T}_{2,inj}$ que \tilde{T}_1 ! Ceci est une caractéristique de la marche méso, elle est plus rapide pour des calculs instationnaire⁹ que la marche macro !

Dans cette configuration, l'écart de température entre la solution linéaire et non-linéaire n'est pas très importante, même en choisissant comme paramètre $\alpha = 0.8$ impliquant une conductivité variant du simple au nonuple. Ceci est dû au fait que le transfert a lieu en milieu infini, et que la conduction homogénéise très rapidement le champ de température. Pour cette raison, nous ne présentons pas de résultat supérieur à 2τ , et il n'est pas intéressant d'estimer des itérations supérieures à 2, T_2 est déjà une très bonne approximation de T . Nous verrons dans les prochaines configurations (section 5.3.3.1), que ce ne sera plus le cas lors de la prise en compte de frontières.

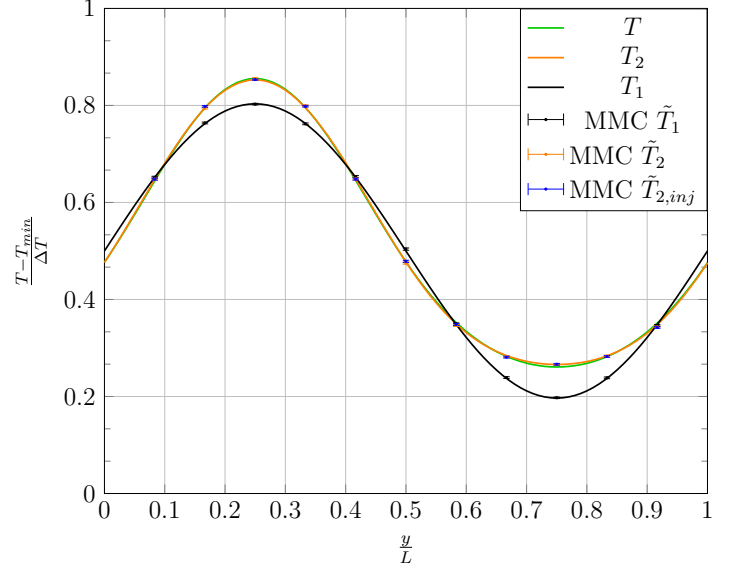
On constate également qu'il est nécessaire de discrétiser plus finement l'espace pour que la marche méso soit acceptable, un centième de la longueur caractéristique d'après notre expérience. Pour rappel, il suffisait de choisir un pas numérique d'un vingtième de la longueur caractéristique, pour que la marche sur δ -sphere soit valable. Ici, ce mauvais comportement vient du fait que le problème est instationnaire, et qu'à temps court, la marche méso ne se propage pas assez vite. Autrement-dit, à temps court, le nombre de collisions n'est pas assez important pour que l'hypothèse H soit "valable" (voir Figure H.2). Cette caractéristique de la marche méso est mise en évidence dans l'Annexe H.

Nous allons à présent nous intéresser à la prise en compte de frontières !

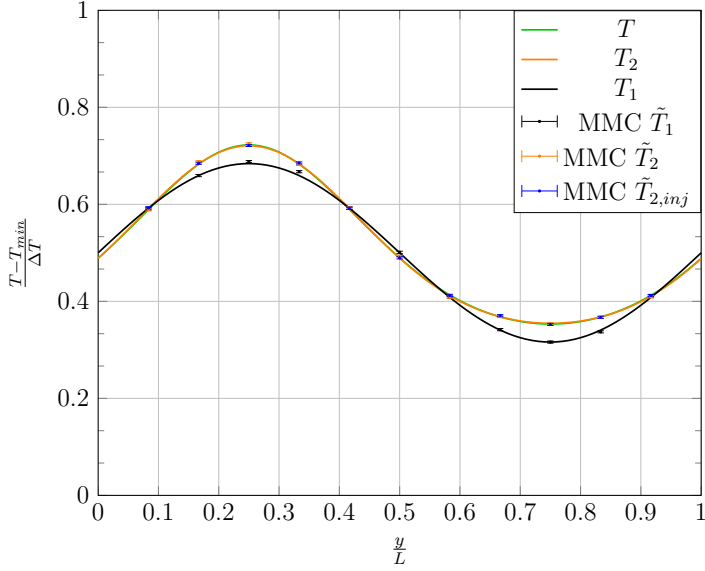
9. Pour des problèmes stationnaires, la marche macro est bien plus rapide que la marche méso : en effet, au stationnaire, la marche macro ne nécessite pas de tirage en exponentielle alors que la marche méso en nécessite toujours un !



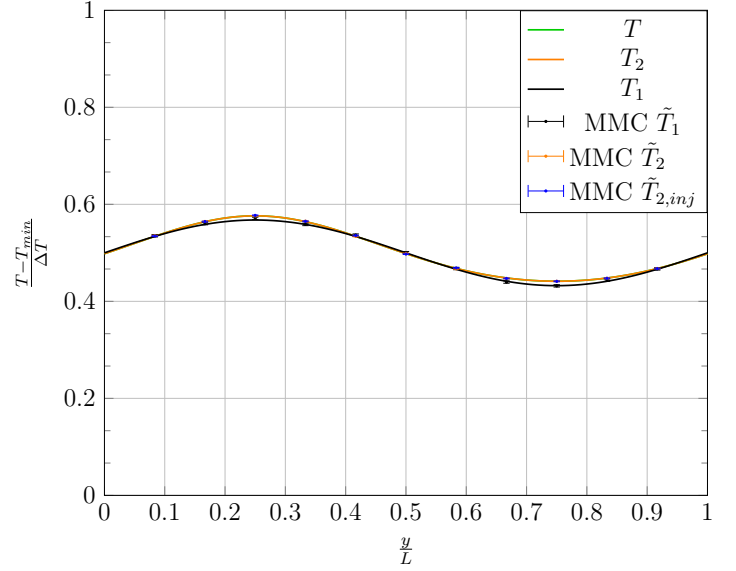
(a) $t_{obs} = 0.2\tau$, $t_{\tilde{T}_1} = 17.9\text{s}$, $t_{\tilde{T}_2,inj} = 12.9\text{s}$ et $t_{\tilde{T}_2} = 26.5\text{s}$



(b) $t_{obs} = 0.5\tau$, $t_{\tilde{T}_1} = 44.5\text{s}$, $t_{\tilde{T}_2,inj} = 32.5\text{s}$ et $t_{\tilde{T}_2} = 89.5\text{s}$



(c) $t_{obs} = \tau$, $t_{\tilde{T}_1} = 88.4\text{s}$, $t_{\tilde{T}_2,inj} = 63.4\text{s}$ et $t_{\tilde{T}_2} = 232\text{s}$



(d) $t_{obs} = 2\tau$, $t_{\tilde{T}_1} = 188\text{s}$, $t_{\tilde{T}_2,inj} = 128\text{s}$ et $t_{\tilde{T}_2} = 667\text{s}$

FIGURE 5.18 – Résultats du MCP pour un transfert thermique instationnaire purement conductif dans un milieu infini de dimension deux, la condition initiale est notée T_I à l'instant t_I . Le modèle de transfert de chaleur est donnée par l'Eq. (4.34). Les courbes pleines noire et verte sont les solutions des problèmes linéarisé et non-linéaire respectivement. Ces solutions sont obtenues à partir du logiciel Matlab (Toolbox). La courbe en trait orange pointillé est l'itération 2 de la méthode de Picard. La barre d'erreur orange est l'estimation des températures obtenues à partir de l'Algorithme 28 pour des libres parcours moyen de $L/(100\sqrt{2})$ où nous avons choisi $T_0 = T_{ref}$ comme initialisation. La barre d'erreur bleue est obtenue à partir du même algorithme où l'on a injecté le champ de température linéaire Eq. (5.17) directement dans le test de probabilité. Les temps de calcul sont donnés pour un nombre de tirages $N = 100000$, un paramètre $\alpha = 0.8$ et un libre parcours moyen de $L/(100\sqrt{2})$ pour l'évaluation de \tilde{T}_2,inj et \tilde{T}_2 , et un pas de $L/100$ pour l'évaluation de \tilde{T}_1 (évalué avec la marche macro). Pour l'évaluation des itérations supérieures à 1, nous avons utilisé une marche macro avec un pas de $L/10$ pour évaluer l'itération un. Les barres d'erreur associées à \tilde{T}_2,inj et \tilde{T}_2 sont "presque" superposées.

5.3.2 Prise en compte d'une frontière

Rappelons que l'Equation (4.34) a été établie en milieu infini et que la considération d'une géométrie fermée constituée de frontières n'est pas si simple ! Pour élaborer le MC (Equation 4.42), nous avons utilisé une similitude entre l'équation de la chaleur et une équation de transport non-linéaire : nous avons pu exprimer la température T comme la moyenne sur l'ensemble des directions de la fonction de distribution f , cette expression étant valable à condition que les propriétés du coefficient de diffusion k et les conditions aux limites de f soient bien choisies.

En milieu infini, les conditions aux limites se résument à la condition initiale f_I et le choix des propriétés de k est naturel : le nombre de collisions doit être suffisamment grand pour que l'approximation de diffusion soit valable (Knudsen petit). En milieu confiné, où nous considérerons une condition de Dirichlet, la difficulté réside dans l'élaboration des conditions de bord puisque dans notre façon de concevoir nos MC, les chemins terminent leurs trajectoires soit à la condition initiale (où T_I et f_I sont connus), soit à la frontière où seule la condition sur $T_{\partial\Omega}$ est connue. Il nous manque donc l'information $f_{\partial\Omega}$! Nous proposons deux stratégies pour contourner ce manque d'information.

5.3.2.1 Avec la stratégie naïve

La première stratégie consiste à réduire suffisamment le libre parcours moyen δ_{me} pour que l'erreur commise à la frontière soit négligeable. Algorithmiquement, cela signifie que la marche est strictement la même que celle employée en milieu infini, et c'est seulement au contact de la frontière qu'elle est stoppée, le poids de Monte-Carlo étant la température de bord. Pour comprendre quelles sont les conditions de validité de cette stratégie, nous considérons la configuration avec des frontières les plus simples possibles : un mur en dimension 1 de longueur L stationnaire, avec condition de Dirichlet : T_{min} en $x = 0$ et T_{max} en $x = L$ (on note $\Delta T = T_{max} - T_{min}$). Les résultats pour différentes valeurs du paramètre δ_{me} sont présentés dans la Figure 5.19.

Ces résultats confirment le fait qu'il est nécessaire de réduire le pas pour que l'approximation soit valable ! En effet, avec un pas inférieur ou égal à $1/50$ de la longueur caractéristique, on observe que l'erreur est encore trop grande, notamment à proximité de la frontière. Il devient alors nécessaire de réduire le pas à environ $1/100$ de la longueur caractéristique pour que ce biais devienne raisonnable.

Rappelons, que dans cette configuration, bien particulière, la marche macro est exacte quelque soit le pas choisi ! Un comportement qui est, suivant cette stratégie, perdu avec la marche méso.

La réduction du libre parcours moyen n'est pas forcément problématique dans cette configuration (mis à part l'augmentation du temps de calcul). En revanche, elle devient catastrophique lorsque l'on considère la non-linéarité $\lambda(T)$: comme expliqué précédemment, la prise en compte de la non-linéarité nécessite la génération de branches à chaque pas, entraînant une explosion de ce nombre à petit Knudsen. La nécessité de réduire le libre parcours moyen δ_{me} entraîne une impraticabilité de l'algorithme lors de la prise en compte de la non-linéarité $\lambda(T)$! Il devient donc nécessaire d'élaborer une nouvelle stratégie.

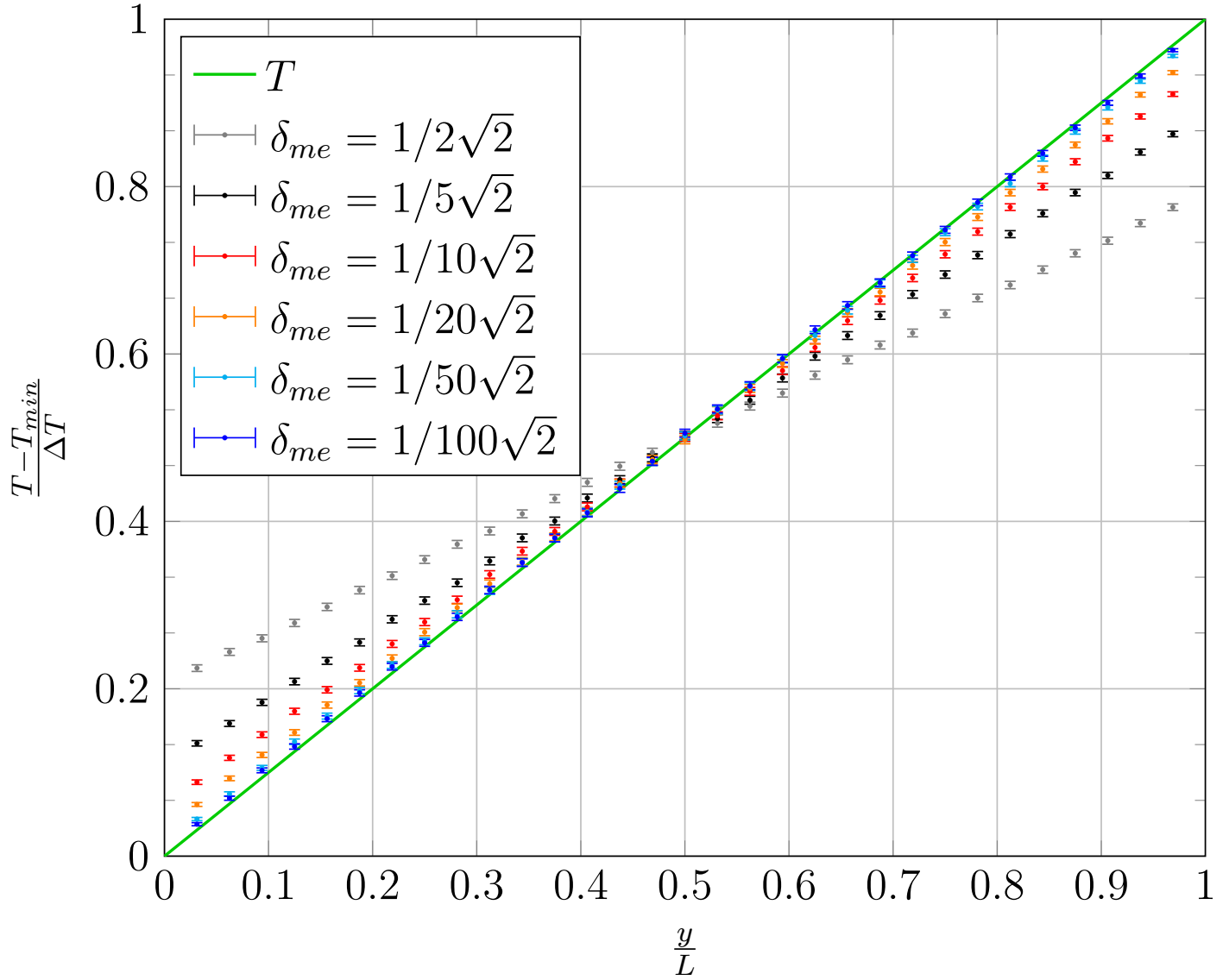


FIGURE 5.19 – [Avec la stratégie naïve] Résultats du MCP pour un transfert thermique stationnaire purement conductif dans un mur d’épaisseur L en dimension un, où est imposée T_{min} en $x = 0$ et T_{max} en $x = L$. Le modèle de transfert de chaleur est donnée par l’Eq. (5.20). La courbe en trait plein verte représente le champ de température T solution de l’Eq. (5.20). Les résultats du MCP (itération 1) sont obtenus à partir de l’Algorithme 16 où nous retenons la température de bords une fois que la trajectoire ait atteint la frontière, le nombre de tirages est $N = 100000$.

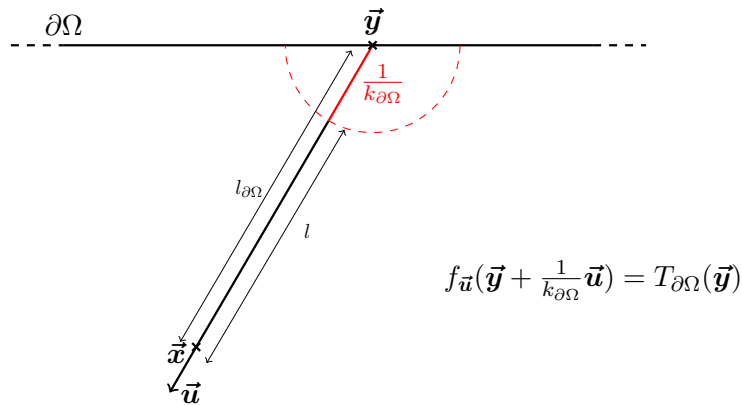
5.3.2.2 Avec la stratégie de Milnes

Pour remédier à cette difficulté (libre parcours moyen trop petit), nous proposons une nouvelle stratégie qui consiste, non plus à réduire δ_{me} , mais au contraire construire une condition de bord $f_{\partial\Omega}$ en fonction de la température imposée à la frontière $T_{\partial\Omega}$. Cette construction, basée sur la proposition de Milnes [90, 91], est détaillée dans l’Annexe G dont nous proposons un rapide résumé dans l’encadré suivant.

Condition de Milne :

Cette stratégie, fréquemment employée dans la littérature du transfert radiatif, est d'habitude employée dans le sens contraire au notre : pour résoudre une équation de transport, la similitude et la condition de Milnes sont employées pour se ramener à la résolution d'une équation de diffusion. Dans beaucoup de contextes, il est souvent bien plus simple de résoudre une équation de diffusion plutôt qu'une équation de transport, notamment lorsque les paramètres optiques et la géométrie sont complexes. Dans ce manuscrit, nous utilisons une démarche strictement opposée à celle-ci : nous avons expliqué au Chap. 4 pourquoi nous avons besoin de remplacer une équation de diffusion par une équation de transport (avec des arguments essentiellement liés à la volonté de pouvoir faire appel aux outils issus de la communauté de la synthèse d'image). Nous devons donc pousser la similitude jusqu'à la frontière et par conséquent, même si nous y arrivons par un autre chemin, nous nous retrouvons face à la même question théorique que celle que Milnes a dû aborder lors de la représentation des effets de bord dans les atmosphères optiquement épaisses.

Après un travail, que nous rappelons dans l'Annexe G, nous en déduisons que la condition de bord $f_{\partial\Omega}$ ne se situe pas strictement sur le bord du domaine $\partial\Omega$, mais décalée d'un libre parcours moyen à l'intérieur du domaine, dans la direction de propagation :

$$f_{\vec{u}}(\vec{y} + \frac{1}{k_{\partial\Omega}}\vec{u}) = T_{\partial\Omega}(\vec{y}).$$


Partant de ce constat, la formulation intégrale (5.16) devient en milieu fermé borné et selon cette stratégie,

$$\left\{ \begin{array}{l}
\tilde{T}_n(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t) \\
f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t) = \mathcal{H}\left(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) < \frac{1}{k_{\partial\Omega}}\right) A(\vec{x}, t) + \mathcal{H}\left(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) > \frac{1}{k_{\partial\Omega}}\right) B(\vec{x}, t) \\
A(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} e^{-k_{\partial\Omega}l} \left[e^{2k_{\partial\Omega}l} T_{\partial\Omega}(\vec{y}, t + t_l) \right] \\ + (1 - e^{-k_{\partial\Omega}l}) \int_0^l \frac{k_{\partial\Omega} e^{-k_{\partial\Omega}l'}}{1 - e^{-k_{\partial\Omega}l'}} dl' \left[-e^{k_{\partial\Omega}l} \tilde{T}_n(\vec{x} + (l - l')\vec{u}, t + t_{l-l'}) \right] \end{array} \right) \\
B(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l') dl' \left[\begin{array}{l} \mathcal{H}(l' > l) C(\vec{x}, t) \\ + \mathcal{H}(l' < l) D(\vec{x}, t) \end{array} \right] \\
C(\vec{x}, t) = \mathcal{H}(t_I > t - t_{l'}) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) + \mathcal{H}(t_I < t - t_{l'}) T_{\partial\Omega}(\vec{y}, t - t_l) \\
D(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - t_{l'}) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - t_{l'}) \left(\begin{array}{l} p(\tilde{T}_{n-1}) \tilde{T}_n \\ + (1 - p(\tilde{T}_{n-1})) f_{\vec{u},n} \end{array} \right)_{|(\vec{x}-l'\vec{u}, t-t_{l'})} \end{array} \right)
\end{array} \right. \quad (5.19)$$

où

- $k_{\partial\Omega} = k(T_{\partial\Omega}) = \frac{c\rho C}{d\lambda(T_{\partial\Omega})}$ avec d la dimension spatiale,
- $p(T) = \frac{k(T)}{k} = \frac{\lambda_{min}}{\lambda(T)}$ une probabilité,
- \mathcal{L} une v.a. de loi exponentielle de paramètre $1/\delta_{me}$,
- \vec{U} une v.a. de loi uniforme sur la sphère S^{d-1} de dimension d ,
- $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) = \min \left\{ \|\vec{x} - \vec{y}'\| ; \vec{y}' \in \text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) \cap \partial\Omega \right\}$ avec $\text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) = \{ \vec{x} - s\vec{u} ; s \in \mathbb{R}_+^* \}$,
- $l = |l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - 1/k_{\partial\Omega}|$,
- $\vec{y} = \vec{x} - l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) \vec{u}$,
- $t_l = \frac{l}{c}$ le temps pour parcourir une longueur l à la vitesse c ,
- $c = \frac{n\lambda_{min}}{\rho C \delta_{me}}$ où n est ici la dimension spatiale,

L'algorithme décrit par la formulation intégrale (5.19) consiste tout d'abord à tirer une direction \vec{u} uniformément sur la sphère. Une fois la direction tirée, deux possibilités se présentent à nous :

1. soit la position \vec{x} est déjà située à moins d'un libre parcours moyen du bord ($l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) < \frac{1}{k_{\partial\Omega}}$) suivant la direction $-\vec{u}$, et dans ce cas on récupère
 - avec la probabilité $e^{-k_{\partial\Omega}l}$ la température $T_{\partial\Omega}$ à la position \vec{y} au temps $t + t_l$ comme poids de MC,

- et avec la probabilité $(1 - e^{-k_{\partial\Omega}l})$ la température \tilde{T}_n à la position $\vec{x} + (l - l')\vec{u}$ au temps $t + t_{l-l'}$ multiplié par $-e^{-k_{\partial\Omega}l}$ comme poids de MC où l' est échantillonné suivant la densité de probabilité $l' \mapsto k_{\partial\Omega}e^{-k_{\partial\Omega}l'}/(1 - e^{-k_{\partial\Omega}l})$. Si cette température est inconnue, on la remplace par un échantillonnage récursif de Θ_n via le principe de double randomisation.
2. soit à plus d'un libre parcours moyen $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) > \frac{1}{k_{\partial\Omega}}$. Dans ce cas, on échantillonne une longueur l' suivant une loi exponentielle de paramètre \hat{k} , puis deux situations sont envisageables :
- soit on atteint la condition de Milnes ($l' > l$) et
 - soit on atteint la condition initiale avant, dans ce cas on récupère la température initiale au point $\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}$,
 - soit on récupère la température de bord $T_{\partial\Omega}$ au point \vec{y} à l'instant $t - t_l$.
 - soit on n'a pas atteint la condition de Milnes ($l' < l$) et,
 - soit on atteint la condition initiale, dans ce cas on récupère la température initiale au point $\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}$,
 - soit on échantillonne une réalisation θ_{n-1} suivant Θ_{n-1} à l'instant et position correspondants via la génération d'une branche, et on construit la probabilité $p(\theta_{n-1})$. Ensuite, avec cette probabilité on retient \tilde{T}_n à l'instant et position correspondants comme poids de MC, et avec la probabilité complémentaire on retient $f_{\vec{u},n}$ à l'instant et position correspondants comme poids de MC. Si \tilde{T}_n ou $f_{\vec{u},n}$ sont inconnues, on les remplace par un échantillonnage récursif de Θ_n et $\mathcal{F}_{\vec{u},n}$ respectivement, via le principe de double randomisation.

L'échantillonnage de la v.a. Θ_n associée à \tilde{T}_n est décrit dans l'Annexe K, Algorithme 28.

Reprenons à présent l'exemple présenté dans la Figure 5.19 dont la température solution correspond à T_1 que l'on approche via \tilde{T}_1 estimée selon l'Algorithme 28. Cet Algorithme, bien plus complexe que le précédent (qui consistait simplement à réduire δ_{me}), est en revanche, bien plus performant comme le démontrent les résultats présentés dans la Figure 5.20.

A travers cette Figure, on constate tout le bénéfice de la stratégie de Milnes. Dans cette configuration bien particulière (profil de température linéaire), les temps de calcul sont similaires à ceux obtenus précédemment, mais en revanche, le libre parcours moyen peut être choisi aussi grand que souhaité ! On retrouve la propriété de la marche macro.

Il est également intéressant de constater une légère augmentation de la variance près des bords : au bord, à moins d'un libre parcours moyen, la température est nécessairement multipliée par une exponentielle, de signe positif ou négatif, faisant augmenter la variance.

En contre partie, on constate une principale difficulté lors de la mise en œuvre de cette stratégie en géométrie complexe : le fait qu'il est possible de sortir de la géométrie ! En effet, en dimension supérieure, il peut arriver qu'on arrive proche d'un coin, puis à l'issue du changement de direction, et suivant la stratégie de Milnes, on se retrouve à l'extérieur du domaine comme illustré dans la Figure 5.22. Un travail supplémentaire devient donc nécessaire pour la mise en œuvre en géométrie complexe. Nous n'avons pas fait ce travail et nous nous sommes donc concentré essentiellement sur le comportement de la non-linéarité en considérant seulement des géométries académiques, le slab en dimension 1 et le carré, où cette difficulté n'a pas été rencontrée.

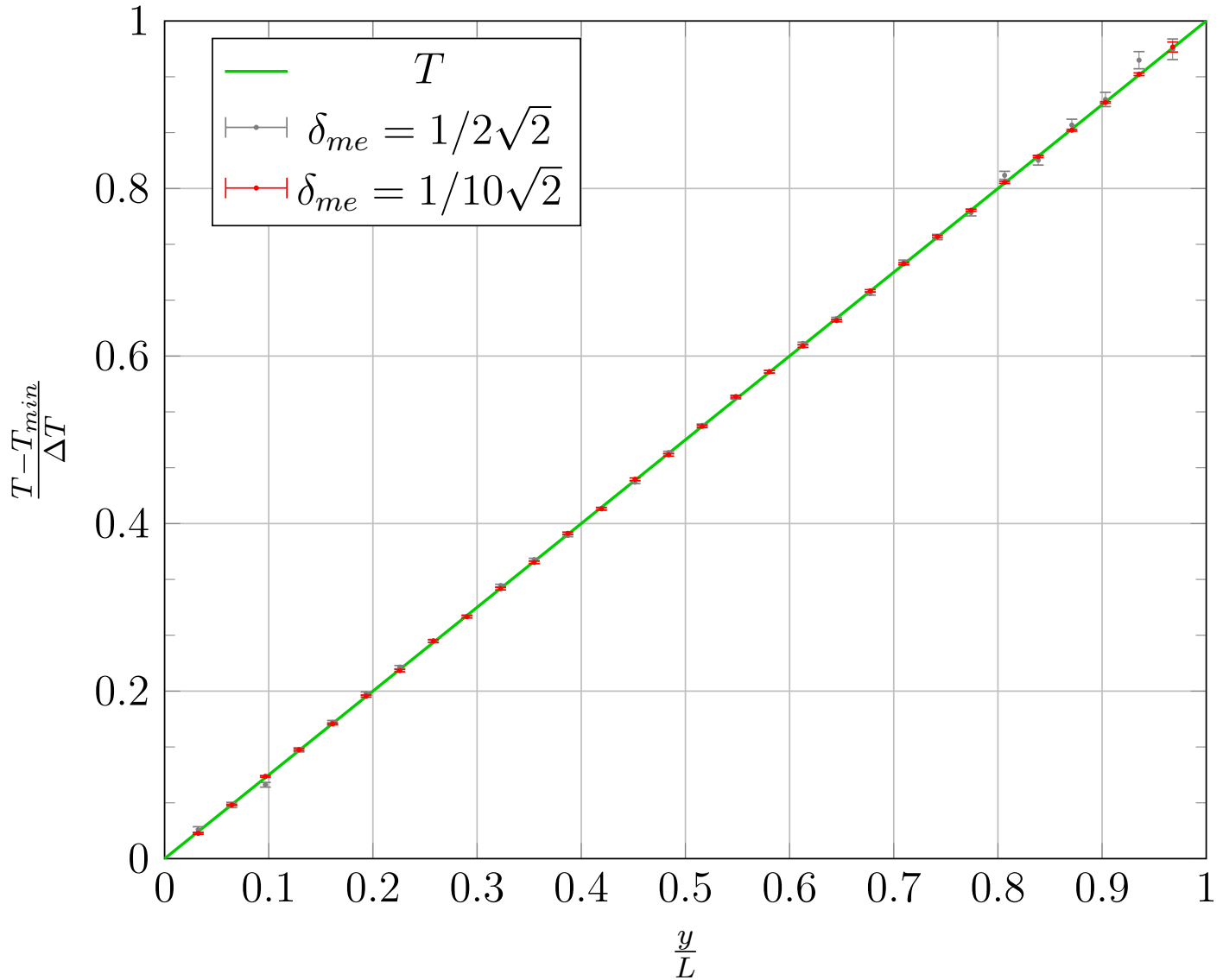


FIGURE 5.20 – [Avec la stratégie de Milnes.] Résultats du MCP pour un transfert thermique stationnaire purement conductif dans un mur d'épaisseur L en dimension un, où est imposée T_{min} en $x = 0$ et T_{max} en $x = L$. Le modèle de transfert de chaleur est donnée par l'Eq. (5.20). La courbe en trait plein verte représente le champ de température T solution de l'Eq. (5.20). Les résultats du MCP (itération 1) sont obtenus à partir de l'Algorithme 28, élaboré selon la stratégie proposée par Milnes, le nombre de tirages étant de $N = 100000$.

Finalement, la stratégie de Milnes est pour nous d'une importance capitale, car elle nous permet de considérer des libres parcours moyens δ_{me} assez grands, ce qui est une nécessité lors de la prise en compte de la non-linéarité $\lambda(T)$. Dans le cas contraire, à Knudsen petit, le nombre de branches générées explose rendant la mise en œuvre impossible, comme expliqué dans la section 4.2.

Une illustration en dimension 2 d'un chemin conductif associé à l'itération T_2 élaboré suivant la stratégie de Milnes est proposé dans la Figure 5.21.

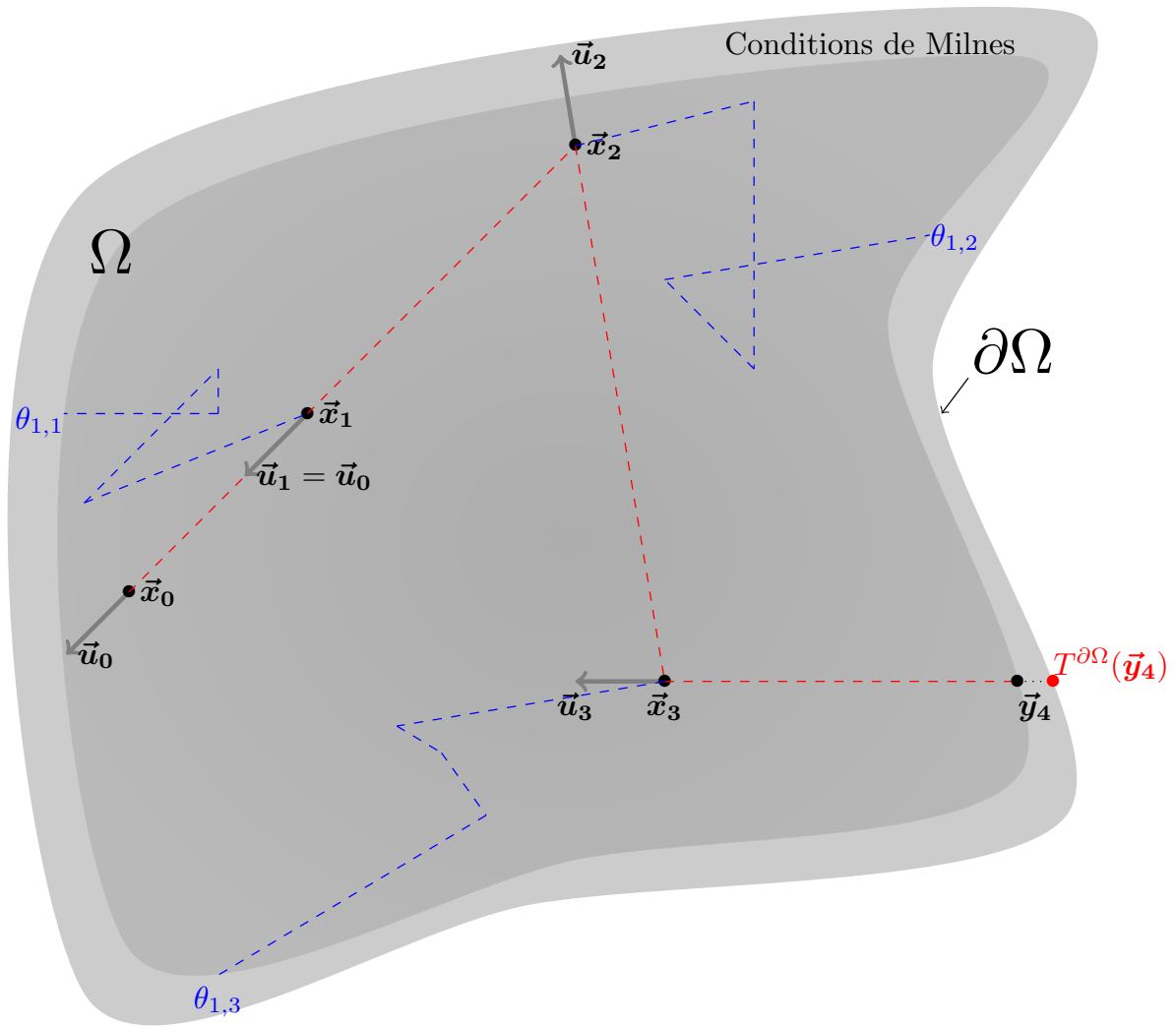


FIGURE 5.21 – Évaluation de la température stationnaire de \tilde{T}_2 à la position \vec{x}_0 . **Première étape** : tirage d'une direction \vec{u}_0 uniforme sur 4π . **Deuxième étape** : tirage d'une longueur suivant une exponentielle de paramètre \hat{k} puis avancée de cette longueur dans la direction \vec{u}_0 en \vec{x}_1 . **Troisième étape** : échantillonner une température suivant Θ_1 à la position \vec{x}_1 (à l'itération 1, la conductivité est homogène), la température retournée est nécessairement une température de bord que l'on note $\theta_{1,1}$. **Quatrième étape** : Grâce à la température $\theta_{1,1}$ on en déduit la probabilité $k(\theta_{1,1})/\hat{k}$ que la collision soit une vraie collision puis on accepte la collision avec cette probabilité, sinon on la rejette. **Cinquième étape** : Si la collision est acceptée, on retourne à la première étape, sinon on retourne à la seconde étape, et on procède de la sorte jusqu'à atteindre une condition de bord.

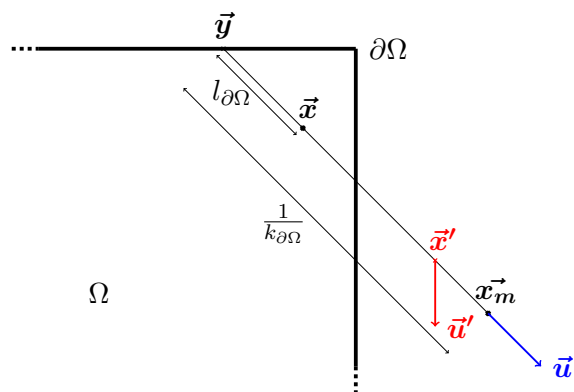


FIGURE 5.22 – Étant donné une position \vec{x} et une direction \vec{u} , il est possible que la position $\vec{x}_m = \vec{y} + 1/k_{\partial\Omega}\vec{u}$ soit située en dehors du domaine Ω . Dans ce cas, la prochaine position échantillonnée $\vec{x}' = \vec{x} + (l - l')\vec{u}$ peut être située en dehors du domaine Ω également !

5.3.3 Résultats en géométrie fermée bornée

5.3.3.1 Mise en œuvre dans une configuration académique : Mur en dimension 1 en régime stationnaire

Dans cet exemple, nous proposons une résolution par Monte-Carlo "à la Picard" d'un problème académique de transfert thermique conductif non-linéaire stationnaire, en dimension 1, à la traversée d'un mur d'épaisseur L . La non-linéarité est due à la dépendance de la conductivité à la température. Le modèle de transfert de chaleur est donnée ci-dessous :

$$\begin{cases} -\partial_x (-\lambda(T)\partial_x T) = 0 & , x \in [0, L] \\ T(0) = T_{min} \\ T(L) = T_{max} \end{cases} \quad (5.20)$$

où λ est la conductivité thermique dépendante de la température T telle que $1/\lambda(T) = 1/\lambda_{ref} + \beta(T - T_{ref})$ avec T_{ref} une température de référence prise égale à $(T_{max} + T_{min})/2$ et β un paramètre pilotant l'importance¹⁰ de la non-linéarité. Les températures T_{min} et T_{max} sont imposées en $x = 0$ et en $x = L$.

En utilisant la stratégie de Picard établie dans la section 5.3, nous construisons premièrement la suite $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ du champ de température :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \begin{cases} -\partial_x (-\lambda(T_{n-1})\partial_x T_n) = 0 & , x \in [0, L] \\ T_n(0) = T_{min} \\ T_n(L) = T_{max} \end{cases} \quad (5.21)$$

où nous choisissons comme initialisation un champ de température T_0 uniforme égal à T_{ref} . Deuxièmement, nous associons à chaque champ de température T_n un modèle approché consistant, de paramètre de discrétisation δ_{me} , dont la température \tilde{T}_n est solution de l'équation (5.19), le MC associé étant l'Algorithme 28. Cet algorithme a été établi dans la section K.4.3 dans le cas instationnaire. Pour l'adapter à notre situation, il suffit de considérer la condition initiale à l'infini des temps de telle sorte qu'elle ne puisse pas être atteinte par nos chemins.

Rappelons que le champ de température \tilde{T}_n converge vers le champ de température T_n lorsque le pas de discrétisation δ_{me} tend vers zéro et que la suite $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est convergente de limite la solution T de l'Eq. (5.21). Ainsi, à condition de choisir le pas de discrétisation δ_{me} assez petit et l'entier n assez grand, le champ de température \tilde{T}_n sera une bonne approximation de T . Dans l'illustration 5.23, nous utilisons cet algorithme pour évaluer une estimation des températures \tilde{T}_1 , \tilde{T}_2 et \tilde{T}_3 solution de l'Eq. (5.19).

10. Plus β est proche de zéro, et plus le problème se comportera de façon linéaire

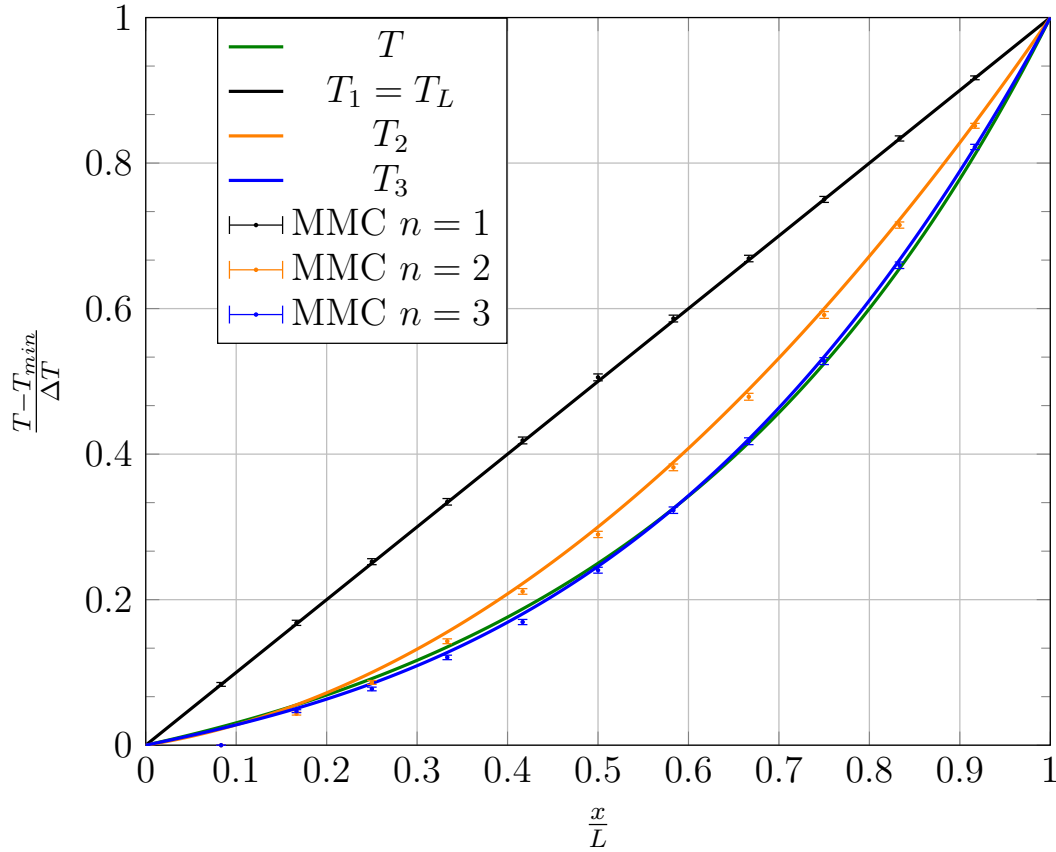


FIGURE 5.23 – Résultats du MCP pour un transfert thermique stationnaire purement conductif dans un mur d'épaisseur L en dimension un, où est imposée T_{min} en $x = 0$ et T_{max} en $x = L$. Le modèle de transfert de chaleur est donné par l'Eq. (5.20). Les quatre courbes en trait plein représentent les champs de température des itérations 1 (noire), 2 (orange) et 3 (bleue) de la suite de Picard, puis la dernière courbe en vert représente le champ de température T solution de l'Eq. (5.20). Les résultats du MCP sont obtenus à partir de l'Algorithme 28 où nous avons choisi comme initialisation $T_0 = T_{ref} = (T_{max} + T_{min})/2$, le nombre de tirages est $N = 100000$, le libre parcours moyen est $\delta_{me} = L/(50\sqrt{2})$. Le paramètre adimensionnel α vérifiant $\alpha = \beta\lambda_{ref}(T_{max} - T_{min})/2$ est fixé à 0.8 (voir section K.4.1), par conséquent la conductivité varie du simple au nonuple (x9). Les temps de calcul sont de 76s, 352s et de 142650s pour les itérations \tilde{T}_1 (barre d'erreur noire), \tilde{T}_2 (barre d'erreur orange) et \tilde{T}_3 (barre d'erreur bleue) respectivement où nous avons choisi de fixer le libre parcours moyen de l'itération un à $L/(10\sqrt{2})$ pour le calcul par MCP des itérations deux et trois.

Nous montrons à travers cette illustration que les estimations de \tilde{T}_1 , \tilde{T}_2 et \tilde{T}_3 par MC sont de bonnes approximations de T_1 , T_2 et T_3 et que T_3 est une bonne approximation de T . Pour réaliser cette figure, le libre parcours moyen est choisi de l'ordre du cinquantième de la longueur caractéristique, alors qu'il est généralement choisi de l'ordre du vingtième dans le cas linéaire. Cette contrainte sur le libre parcours moyen est due à l'emploi des collisions nulles, la conséquence étant qu'il n'y a pas forcément de changement de direction à chaque saut : si la probabilité $p = k/\hat{k}$ d'obtenir une vraie collision est faible, alors la particule se déplacera en ligne droite en moyenne de δ_{me}/p . Pour que l'approximation soit valable, nous avons en effet constaté qu'il est nécessaire de choisir δ_{me} tel que δ_{me}/p soit environ de l'ordre

du vingtième de la longueur caractéristique.

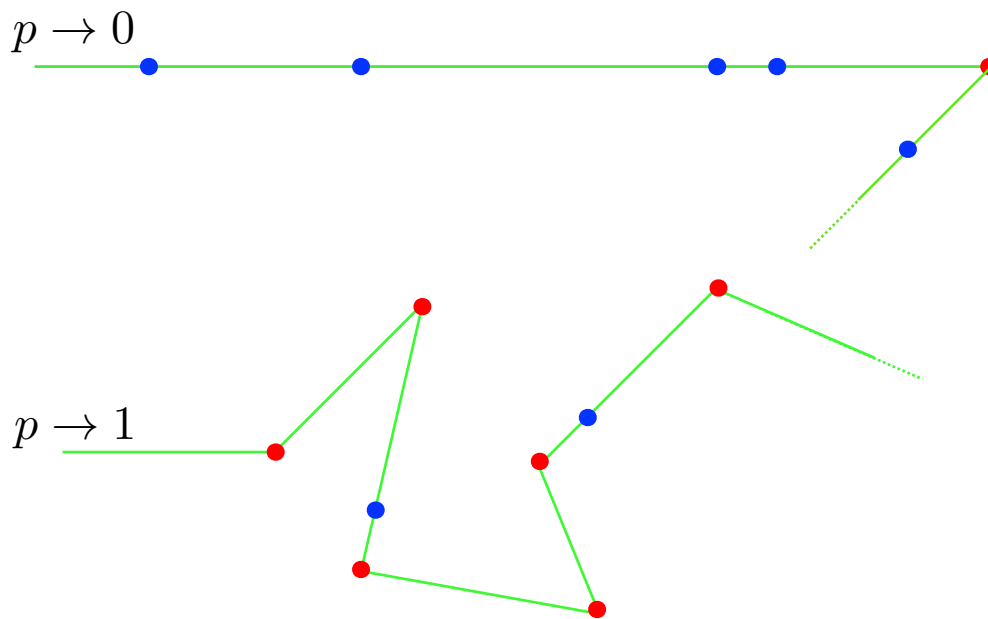


FIGURE 5.24 – Influence de la probabilité de rejet p sur la longueur de collision : plus p est petit, plus la probabilité de rejeter la collision est grande et plus la longueur échantillonnée sera grande.

On montre également que le temps de calcul est fonction croissante de l'itération. Dans la Figure 5.23, le rapport des temps de calcul entre l'itération 2 et 3 est de 400. Cette propriété est la conséquence du branchement : à chaque collision de l'itération n , est générée avec la probabilité $1 - \lambda_{min}/\lambda_{max}$ une branche de l'itération $n - 1$, qui à son tour sera à l'origine de branches de l'itération $n - 2$ et ainsi de suite. Ce rapport 400 est finalement égal au nombre de branches moyen générées le long d'une trajectoire et il sera d'autant plus grand que le libre parcours moyen δ_{me} est petit.

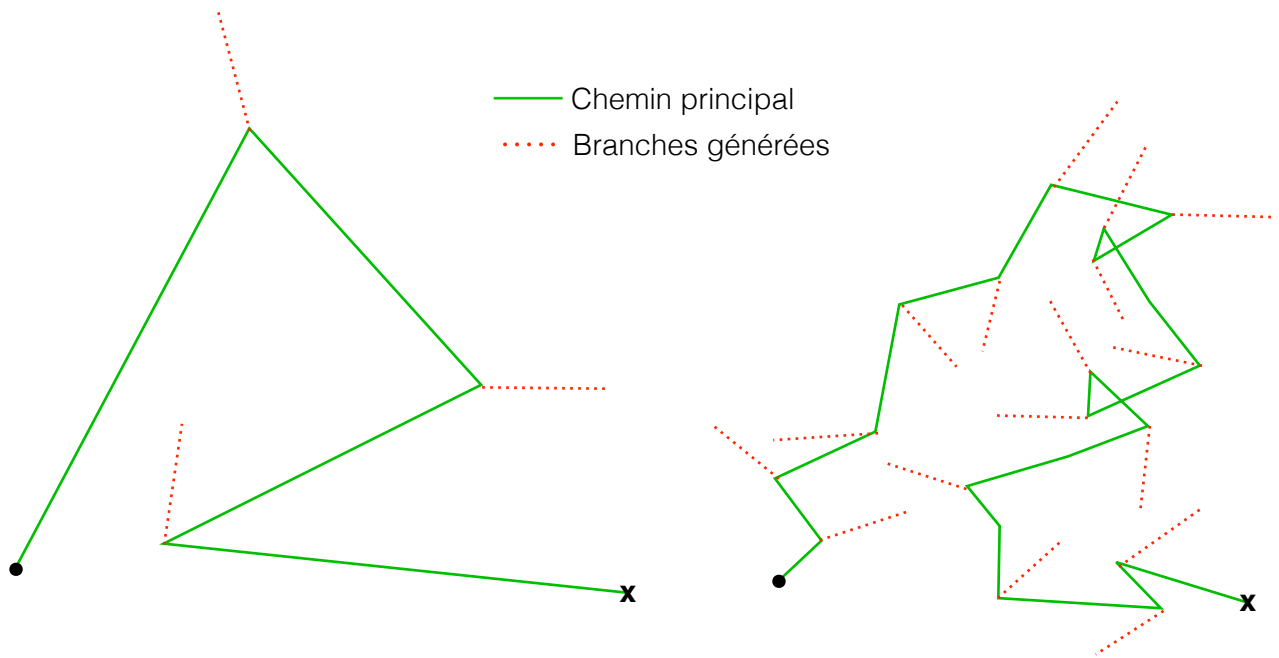


FIGURE 5.25 – Influence du nombre de branches générées en fonction du libre parcours moyen δ_{me} : plus δ_{me} est petit et plus le nombre de branches générées est grand.

Remarquons que ce rapport entre l'itération 1 et 2 est quant à lui de 5 et non de 400. Ceci est dû au fait que nous avons choisi de fixer le libre parcours moyen à un dixième de la longueur caractéristique pour évaluer les réalisations de l'itération 1 lors des branchements générés durant l'évaluation de l'itération deux. Sans cette astuce, le rapport aurait été de l'ordre de 400 également. Nous constatons également que ce rapport est fonction de la probabilité $\lambda_{min}/\lambda_{max}$: plus cette probabilité sera grande et plus la probabilité de générer une branche le sera aussi, puisque une branche est générée à chaque collision avec la probabilité $1 - \lambda_{min}/\lambda_{max}$.

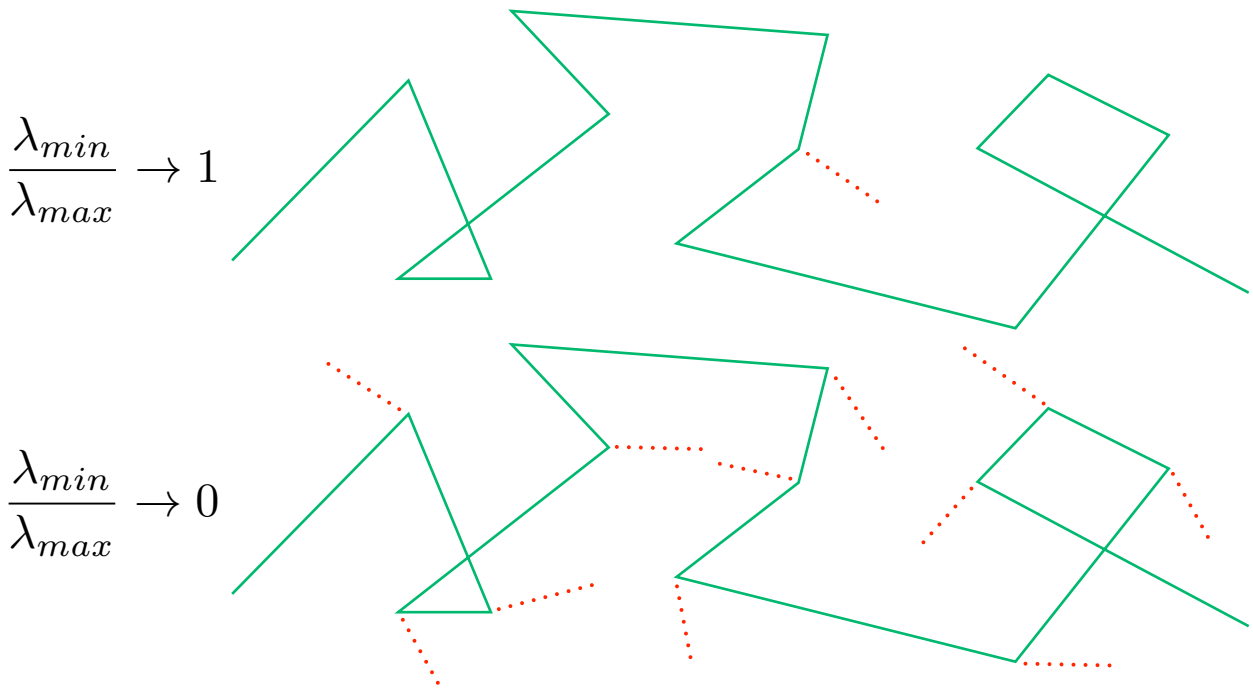


FIGURE 5.26 – Influence du rapport $\lambda_{min}/\lambda_{max}$ (de façon équivalente du choix du majorant \hat{k}) sur le nombre de branches générées : plus ce rapport est petit est plus le nombre de branches générées est grand.

En conclusion, plus la non-linéarité est importante (autrement-dit, plus $\lambda_{min}/\lambda_{max}$ est petit) et

- plus le libre parcours moyen δ_{me} doit être choisi petit pour que la longueur des sauts moyenne δ_{me}/p soit de l'ordre du vingtième de la longueur caractéristique (Figure 5.24).
- plus le nombre moyen de collisions et donc le nombre d'occasions de générer une nouvelle branche le long d'une trajectoire sera grand (Figure 5.25).
- plus la probabilité de brancher à chaque collision sera grande (Figure 5.26), car une branche est générée à chaque collision avec la probabilité $1 - \lambda_{min}/\lambda_{max}$ (plus la non-linéarité est importante et plus $\lambda_{min}/\lambda_{max}$ est petit).

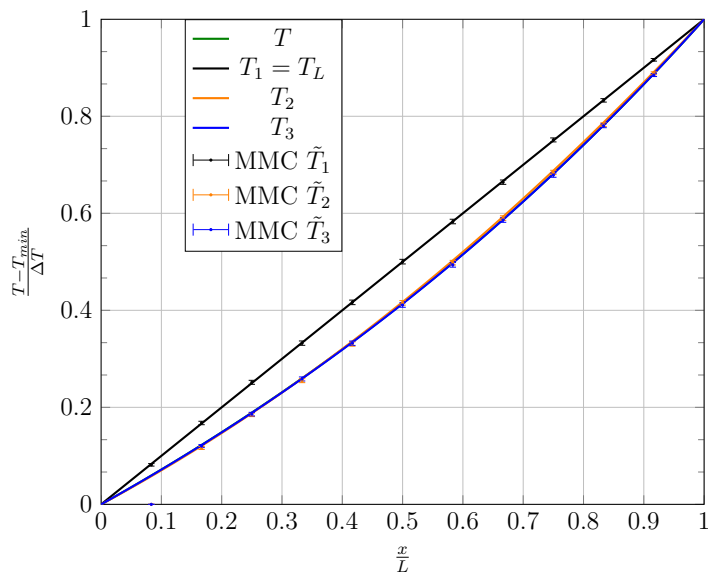
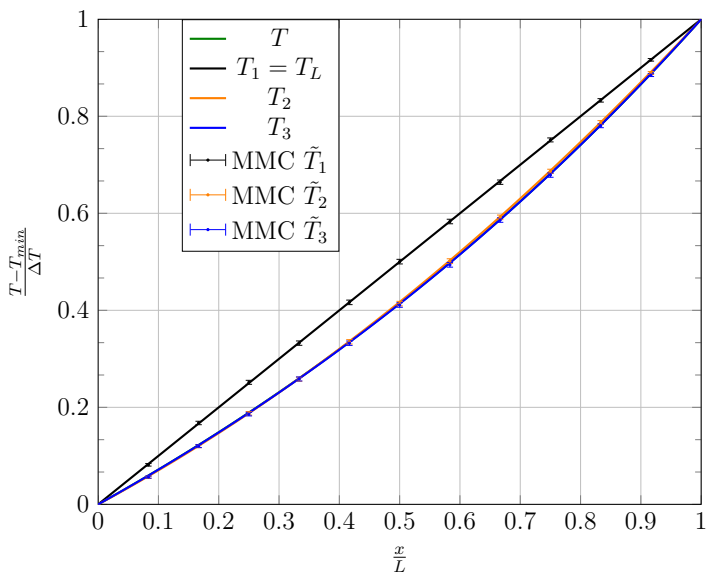
ces trois propriétés contribuant à l'augmentation du temps de calcul global.

Toutes ces propriétés sont la conséquence de l'emploi des collisions nulles. En effet, plus la variabilité de la conductivité est grande et plus la probabilité de faire une collision nulle¹¹ l'est aussi. Par conséquent, si l'on note \bar{N}_{cn} le nombre moyen de collisions nulles consécutives, alors la particule parcourt en moyenne une longueur de $\delta_{me}\bar{N}_{cn}$. Si cette longueur moyenne est trop élevée, du fait que δ_{me} est choisi trop grand où que le nombre moyen de collisions nulles consécutives \bar{N}_{cn} est trop grand, alors l'approximation n'est pas valable.

Pour ces différentes raisons, nous nous limiterons dans la suite du manuscrit à une variabilité de la conductivité allant environ du simple au double, ce qui nous permet de choisir un libre parcours moyen de l'ordre du cinquantième (un vingtième est également envisageable

11. la probabilité de faire une collision nulle est égale à $1 - \lambda_{min}/\lambda(T)$

dans cette configuration à une dimension) de la longueur caractéristique avec des temps de calcul raisonnables, comme présenté dans la Figure 5.27.



(a) $\delta_{me} = L/(50\sqrt{2})$. Les temps de calcul sont de 38s, 330s et de 59432s pour les itérations \tilde{T}_1 (barre d'erreur noire), \tilde{T}_2 (barre d'erreur orange) et \tilde{T}_3 (barre d'erreur bleue) respectivement où nous avons choisi de fixer le libre parcours moyen de l'itération un à $L/10$ pour le calcul par MC des itérations deux et trois.

(b) $\delta_{me} = L/(20\sqrt{2})$. Les temps de calcul sont de 3s, 15s et de 212s pour les itérations \tilde{T}_1 (barre d'erreur noire), \tilde{T}_2 (barre d'erreur orange) et \tilde{T}_3 (barre d'erreur bleue) respectivement où nous avons choisi de fixer le libre parcours moyen de l'itération un à $L/10$ pour le calcul par MC des itérations deux et trois.

FIGURE 5.27 – Résultats du MCP pour un problème de transfert thermique stationnaire purement conductif dans un mur d'épaisseur L en dimension un, où est imposée T_{min} en $x = 0$ et T_{max} en $x = L$. Le modèle de transfert de chaleur est donné par l'Eq. (5.20). Les quatre courbes en trait plein représentent les champs de température des itérations 1 (noire), 2 (bleu) et 3 (rouge) de la suite de Picard (5.21), puis la dernière courbe en vert représente le champ de température solution de l'Eq. (5.20) notée T . Les résultats MMC sont obtenus à partir de l'Algorithme 28 où nous avons choisi comme initialisation $T_0 = T_{ref} = (T_{max} + T_{min})/2$, le nombre de tirage est $N = 100000$, le libre parcours moyen est $\delta_{me} = L/(50\sqrt{2})$ pour la figure 5.27a et de $\delta_{me} = L/(20\sqrt{2})$ pour la figure 5.27b. Le paramètre adimensionnel α vérifiant $\alpha = \beta\lambda_{ref}(T_{max} - T_{min})/2$ est fixé à $1/3$ (voir section K.4.1), par conséquent la conductivité varie du simple au double.

On constate à travers cette figure, que \tilde{T}_2 est une bonne approximation de T . Le rapport des temps de calcul entre \tilde{T}_L et \tilde{T}_2 est de dix, pour un pas d'un cinquantième de la longueur caractéristique et de cinq pour un pas d'un vingtième de la longueur caractéristique. Rappelons que ces rapports dépendent du nombre moyen de collision rencontrées le long d'une trajectoire. De plus, nous pouvons considérer des pas d'un vingtième de la longueur caractéristique car nous avons employé la proposition de Milnes. Dans le cas contraire, nous serions contraints à utiliser des pas d'un centième de la longueur caractéristique faisant augmenter inévitablement le temps de calcul !

Dans le prochain exemple, nous considérons le même problème conductif, cette fois-ci dans un cube de dimension deux (un barreau de section carrée) en instationnaire.

5.3.3.2 Mise en œuvre dans une configuration académique : Carré au stationnaire

Nous considérons à nouveau le problème de transfert thermique conductif défini par l'Eq. (4.34), cette fois-ci dans un cube de côté L en dimension deux en instationnaire, où les conditions aux limites sont données ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{\partial\Omega}(x, y) = \begin{cases} T_{max} & \text{si } x = 0 \text{ et } y \in [0, L] \\ T_{max} & \text{si } x = L \text{ et } y \in [0, L] \\ T_{min} & \text{si } y = 0 \text{ et } x \in [0, L] \\ T_{min} & \text{si } y = L \text{ et } x \in [0, L] \end{cases} \\ \\ T_I = (T_{max} + T_{min})/2 \end{array} \right. \quad (5.22)$$

où T_{min} et T_{max} sont les températures minimale et maximale du problème, T_I est la condition initiale donnée à l'instant t_I et $T_{\partial\Omega}$ la température de bord. La conductivité dépend de la température de la façon suivante $1/\lambda(T) = 1/\lambda_{ref} + \beta(T - T_{ref})$ avec λ_{ref} la conductivité du matériau sans prendre en compte la non-linéarité, T_{ref} la température de référence considérée uniforme égale à $(T_{max} + T_{min})/2$ et β un paramètre permettant de piloter l'importance de la non-linéarité.

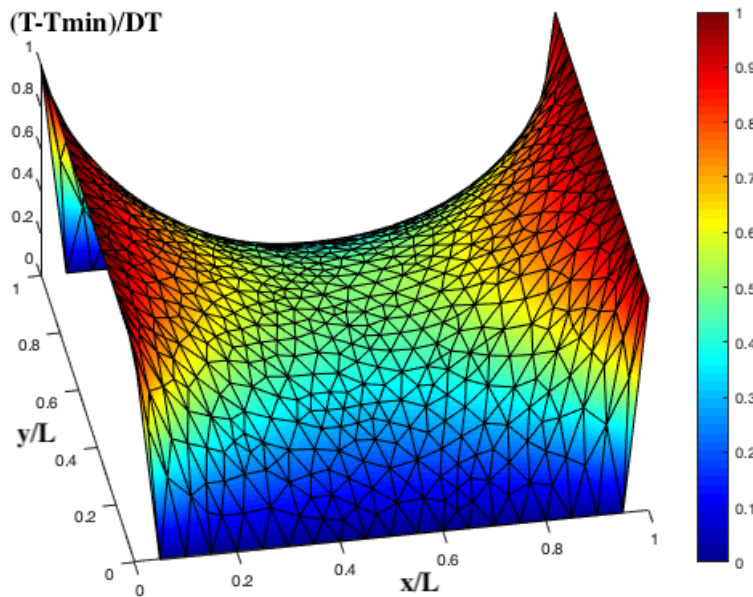
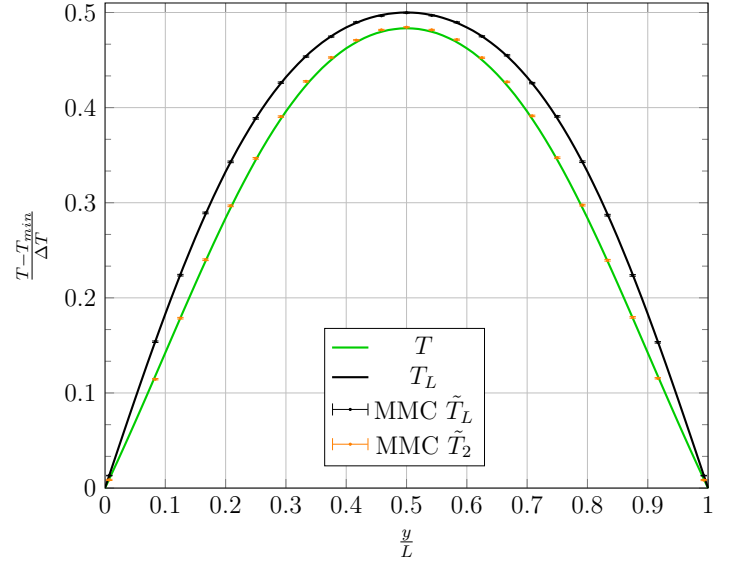
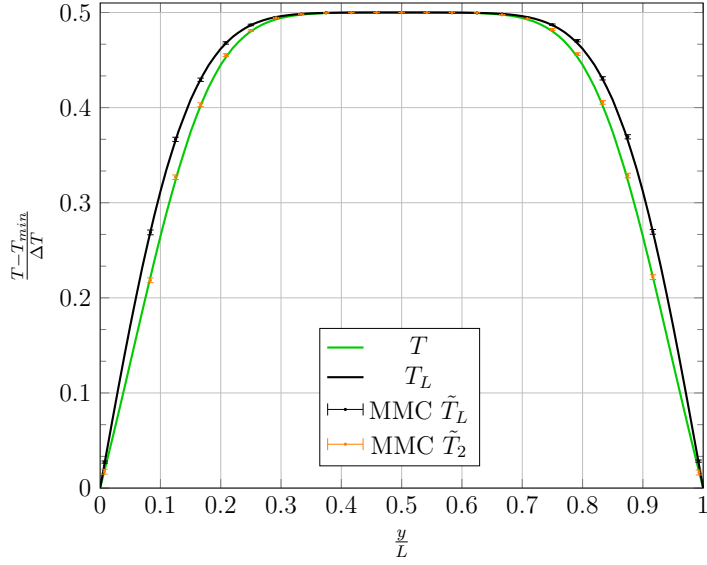


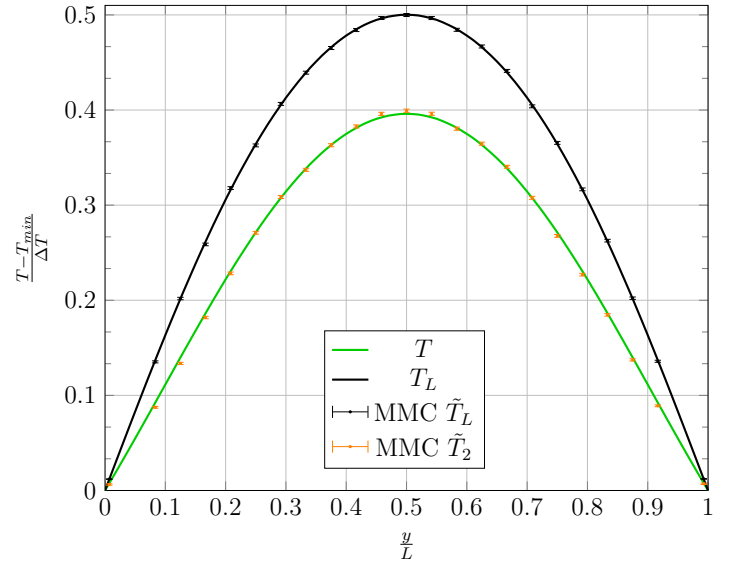
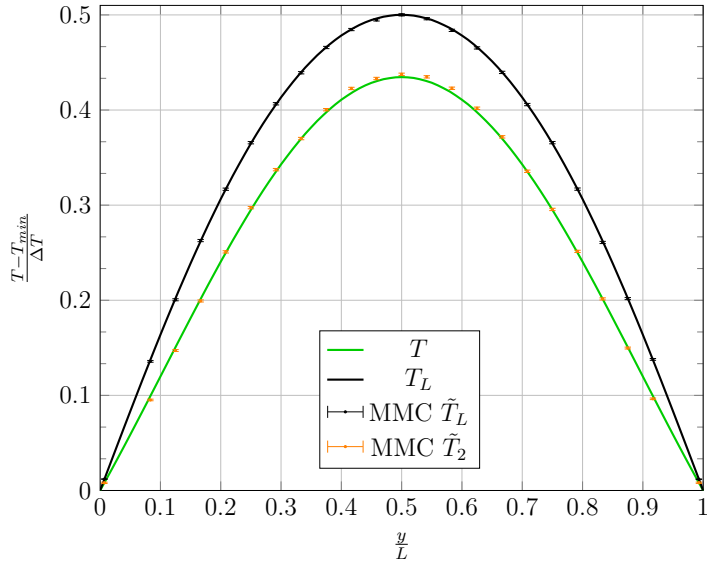
FIGURE 5.28 – Profil de la température stationnaire de T solution des l'équations (4.34)-(5.22).

Les résultats du MCP sont présentés dans la Figure 5.29 suivant $x = L/2$ pour différents temps d'observation.



(a) $t = \frac{\tau}{2}$. Les temps de calcul sont de 86s et 131s pour les itérations \tilde{T}_1 et \tilde{T}_2 respectivement.

(b) $t = 2\tau$. Les temps de calcul sont de 323s et 917s pour les itérations \tilde{T}_1 et \tilde{T}_2 respectivement.



(c) $t = 5\tau$. Les temps de calcul sont de 693s et 2957s pour les itérations \tilde{T}_1 et \tilde{T}_2 respectivement.

(d) $t = 1000\tau$. Les temps de calcul sont de 875s et 7754s pour les itérations \tilde{T}_1 et \tilde{T}_2 respectivement.

FIGURE 5.29 – Résultats du MCP pour un problème de transfert thermique stationnaire purement conductif dans un carré de côté L (dimension deux), où est imposée T_{min} sur les bords $y = 0$ et $y = L$, et T_{max} sur les bords $x = 0$ et $x = L$. Le modèle de transfert de chaleur est donné par l'Eq. (5.22), la condition initiale est notée T_I à l'instant t_I , elle est uniforme. Les deux courbes en trait plein représentent les champs de température de l'itération 1 en noir et du champ de température solution de l'Eq. (5.20) notée T en vert. Les résultats du MCP sont obtenus à partir de l'Algorithme 28 où nous avons choisi comme initialisation $T_0 = T_{ref} = (T_{max} + T_{min})/2$, le nombre de tirages est $N = 100000$, le libre parcours moyen est $\delta_{me} = L/(50\sqrt{2})$. Le paramètre adimensionnel α vérifiant $\alpha = \beta\lambda_{ref}(T_{max} - T_{min})/2$ est fixé à 0.4 (par conséquent $\lambda_{min}/\lambda_{max} = 3/7$). Le temps caractéristique $\tau = \rho C/\lambda_{ref}8\pi^2$, il est choisi via la prochaine étude en milieu infini.

On retrouve ici, le même comportement que dans le cas du slab étudié précédemment. Dans cette configuration, en choisissant comme paramètre adimensionnel $\alpha = 0.4$ (i.e $\lambda_{min}/\lambda_{max} = 3/7$), on constate que l'itération T_2 est acceptable comme approximation de T .

5.4 Conclusion de la mise en œuvre de l'algorithme MCP

Dans ce chapitre, nous avons proposé une stratégie basée sur la méthode de Picard (appelée Monte-Carlo Picard (MCP)) que nous avons mise en œuvre en transfert radiatif σT^4 et en conductif $\lambda(T)$.

En transfert radiatif σT^4 , le passage à l'échelle a été réalisé et l'équipe Mésostar envisage actuellement d'intégrer notre proposition au code Stardis [23]. Nous avons également identifié les limites potentielles de la méthode, qui sont dues soit à des écarts de température trop importants, soit à des phénomènes de piégeage bien connus. Dans les autres situations, le MCP reste très efficace.

Nous avons également démontré son efficacité en transfert conductif $\lambda(T)$. En revanche, il reste encore un travail important à réaliser concernant la gestion des conditions de bord via la marche mésoscopique. Tant que ce travail ne sera pas achevé, la mise en œuvre de MCP pour $\lambda(T)$ restera difficilement praticable en géométrie complexe mais nous restons confiants sur cette perspective et ne voyons aucun point de blocage associé à la non-linéarité lors du passage en dimension 3.

Finalement, et malgré le fait que la méthode de Picard est connue pour n'être intéressante que pour un nombre limité de problèmes et avoir de mauvaises propriétés de convergence, elle s'avère pertinente pour nos problèmes de transferts de chaleur : elle converge "rapidement" et permet de contourner la difficulté associée aux branchements issus d'une combinaison des trois algorithmes non-linéaires dont nous sommes partis au chapitre 3. Nous perdons l'exactitude, l'arbre de troncature du développement doit être testé comme un paramètre de convergence, mais les difficultés identifiées par G. Terrée, celles liées au nombre de branchements, sont contournées d'une manière qui n'entame aucune de qualités des algorithmes de thermique linéaire face à la complexité géométrique.

Chapitre 6

Synthèse

Dans ce chapitre, nous allons récapituler la question de départ, et notre proposition principale pour y répondre, en l'état actuel des travaux. Au cours du travail, nous avons par ailleurs exploré des stratégies alternatives pour contenir l'explosion du nombre de branchements, dont deux ouvrent des perspectives qui méritent d'être exposées. Nous en présentons seulement le principe dans ce chapitre de synthèse, et nous les développons plus en détail dans le chapitre suivant (7).

6.1 Notre question

Nous avons commencé cette thèse avec comme principal objectif de proposer un outil supplémentaire pour accompagner le thermicien dans des phases d'approfondissement de sa compréhension des mécanismes de transferts¹ en géométrie complexe. La question à laquelle nous avons été confrontés est la suivante :

Quelles approches possibles pour simuler des transferts thermiques couplés dans des géométries d'un très haut niveau de complexité sachant que puisque nous devons contribuer à leur validation, nous ne pouvons justement pas avoir recours à des modèles effectifs équivalents (nous devons accepter toute la physique de départ malgré la complexité géométrique) ?

Pour répondre à cette question, nous avons choisi d'employer la méthode statistique de Monte-Carlo, via le calcul de la température d'un ensemble de points sonde ponctuels, surfaciques ou volumiques, méthode qui est bien connue pour être très peu sensible aux grandes dimensions de la géométrie de l'objet d'étude.

La proposition présentée dans cette thèse repose sur un travail collectif concernant l'étude de la thermique linéaire par MC dont nous avons proposé une synthèse théorique dans le Chapitre 3. Notre objectif était ensuite, d'étendre cette approche à des thermiques non-linéaires.

Pour cela, nous avons proposé de regarder les différents transferts thermiques non-linéaires sous l'angle de la physique du transport, avec comme principales motivations de les unifier

1. Quand on parle de compréhension des mécanismes de transferts, on pense notamment à la visualisation du propagateur dans la géométrie, via un ensemble de trajectoires telles que celles décrites tout au long de ces différents chapitres.

pour ensuite pouvoir employer les trois stratégies établies dans [13], que nous avons détaillées dans 4.1.1, 4.1.2 et 4.1.3.

Nous savions, avant même d'avoir commencé cette thèse, que nous serions confrontés à la difficulté de prise en compte des branchements, les mêmes branchements que ceux rencontrés par G. Terrée et qui ont été qualifiés de bloquants ! Comme attendu, nous les avons observés à petit Knudsen. Tout au long du travail, nous avons travaillé sur différentes stratégies de contournement pour éviter l'explosion du nombre de branches, et deux d'entre elles ouvrent des perspectives intéressantes : la transformation de Kirchoff et une reformulation intégrale pour le rayonnement σT^4 . Les avancées sur ces deux stratégies sont présentées plus loin (chapitre 7) en tant que perspectives parce qu'elles n'ont pu aboutir, à ce jour, à leurs pleines conclusions en termes applicatifs pour des systèmes couplés. A partir de ce constat, nous avons fait un choix, lourd de conséquences : employer une troncature du nombre de branches, dont les fondements théoriques sont basés sur le développement de Picard, afin de rendre l'algorithme praticable au prix d'une approximation (abandonner l'exactitude de l'estimateur). Cette stratégie s'est finalement avérée très pertinente dans le contexte des transferts thermiques couplés et elle est donc, ici, notre proposition principale.

6.2 Notre proposition : Monte-Carlo Picard

Nous résumerons la pertinence de cette approche en soulignant les points suivants :

- avec le T^4 du rayonnement, nous avons montré que le passage à l'échelle était effectif et les résultats ont permis de confirmer tout l'intérêt et la robustesse de cette stratégie. L'équipe Mésostar envisage actuellement le codage de cette technique dans Stardis.

Une fois ce travail réalisé, il sera alors tout à fait envisageable de reproduire les mêmes résultats de simulation que ceux de la Figure 3.26 en prenant cette fois-ci en compte la non-linéarité du rayonnement thermique T^4 . On s'attend à observer

- la même insensibilité au nombre de cellules de kelvin, car l'exploration des chemins n'est pas affectée par la non-linéarité (rien ne nous amène à penser que la complexification de la géométrie pourrait avoir des traductions différentes de celles du linéaire),
- et une augmentation du temps de calcul qui serait fonction de l'itération considérée mais également de l'importance du transfert radiatif par rapport aux deux autres transferts : à la limite où le rayonnement ne joue pas de rôle essentiel, notre algorithme se comporte comme dans le cas linéaire. Une autre façon de penser cette augmentation du temps de calcul, est de voir qu'il est fonction du nombre moyen de départs en rayonnement (le lieu des potentiels branchements).

Cette augmentation du temps de calcul (qui restera raisonnable pour des itérations en petit nombre) peut théoriquement toujours être contrôlée grâce au choix de l'initialisation qui est d'une importance capitale. Lors de la mise en œuvre, il sera intéressant (pour gagner en convergence et en temps de calcul) d'envisager de réaliser un pré-calcul via l'algorithme de Loris Ibarrart pour que l'initialisation soit la plus proche possible du champ de température recherché : d'un point de vue théorique, à la limite où l'on choisit comme initialisation la "solution du problème", la non-linéarité ne pose plus aucune difficulté.

Le dernier point important à mentionner est le comportement asymétrique en température que nous avons illustré dans la section 5.2.2. Il faudra donc garder en mémoire que l'on peut rencontrer des problèmes de ce type. Cette asymétrie est due à l'emploi des collisions nulles et notamment à la non-linéarité qui se traduit par la dépendance du coefficient d'extinction $k(T)$ à la grandeur T : la probabilité que la collision échantillonnée soit vraie est $p(T) = k(T)/\hat{k}$ et la probabilité qu'elle soit nulle est $1 - p(T)$. Par conséquent, l'algorithme génère d'autant plus de collisions nulles que $p(T)$ est faible, impliquant une augmentation du nombre de collisions et donc de branches générées et finalement du temps de calcul (contrairement à la conduction, les collisions sont seulement temporelles, elles ne sont pas systématiquement suivies d'un déplacement spatial ; par conséquent, lorsque $k(T)$ est faible, le nombre de collisions nulles nécessaires pour que la trajectoire trouve une issue est grand, d'où l'asymétrie en température). Une nouvelle fois, cette asymétrie en température peut être gommée en choisissant une température de référence la plus proche possible de la solution recherchée (par exemple via l'initialisation).

- Concernant la conductivité variable $\lambda(T)$, nous nous sommes concentrés sur le comportement de l'algorithme de Picard face à la non-linéarité, guidé à chaque instant par la volonté de le mettre en oeuvre en géométrie complexe. La question du passage à l'échelle (dans un code type industriel, comme Stardis [23]) nécessite un approfondissement concernant la gestion des conditions de bords en géométrie 3D, conséquence de la "marche méso" que nous utilisons comme approximation du brownien. En dehors de cette difficulté liée à la gestion des frontières, on ne voit aucun blocage à la mise en oeuvre 3D, et aucune autre difficulté liées au 3D que celles que nous avons identifiées en 1D et 2D.

La première caractéristique importante de notre algorithme est une conséquence de l'emploi des ACN pour gérer la non-linéarité $\lambda(T)$. On a vu que selon cette stratégie, la non-linéarité était reportée dans le coefficient d'extinction $k(T)$ à l'origine de la nature des collisions échantillonnées : soit la collision est vraie avec la probabilité $p(T) = k(T)/\hat{k}$, soit elle est virtuelle ou nulle avec la probabilité $1 - p(T)$. Dans le cas où la collision échantillonnée est nulle, aucun changement de direction n'a lieu. Ainsi, dans les zones où les collisions nulles sont importantes, la longueur moyenne des sauts est plus grande que prévue d'où la nécessité de choisir un libre parcours moyen plus petit. Mais puisqu'on ne connaît pas à l'avance ces zones, il devient nécessaire de choisir un libre parcours moyen plus petit dans tout le système quitte à générer beaucoup trop de collisions (par endroits) pour rien (voir figure 4.7). Pour cette raison, nous nous sommes limités à des conductivités variant du simple à un peu plus du double et n'avons pas considéré des conductivités plus "violentes" comme dans certaines modélisations du transfert thermique avec changement de phase où les conductivités apparentes peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur.

La deuxième caractéristique vient du fait que le nombre de branches générées est fonction croissante du nombre moyen de collisions rencontrées le long d'une trajectoire et nous cherchons donc une nouvelle fois à pouvoir considérer un libre parcours moyen le plus grand possible. Partant de ce constat, il est fondamental de travailler la gestion des conditions de bord car la première stratégie qui consiste à réduire drastiquement le libre parcours moyen, de telle sorte que l'erreur commise au bord soit négligeable n'est

absolument pas envisageable (voir section 5.3.2). Il devient donc nécessaire de proposer une technique astucieuse à la frontière. Nous nous sommes alors orientés vers la théorie de Milnes qui permet de considérer un libre parcours moyen raisonnablement "grand" pour approcher le brownien en géométrie fermée. En revanche nous avons observé une difficulté bien particulière : la trajectoire générée selon cette technique peut sortir d'une géométrie fermée comme expliqué dans l'Annexe G. Cette situation est d'autant plus probable dans des géométries où les frontières sont composées d'une multitude de recoins. Dans notre étude nous avons considéré un cube de côté 1 et n'avons observé aucun problème de ce type avec un libre parcours moyen de $1/(50\sqrt{2})$.

Une dernière caractéristique de notre proposition est la gestion du profil de la conductivité variable $\lambda(T)$. En l'état, nous avons choisi de n'étudier que des matériaux pour lesquels il est possible de linéariser la dépendance à T de $1/\lambda$. Ce choix est initialement motivé seulement par un objectif de simplification et rien ne nous empêche de considérer une troncature supérieure dans le développement en série de Taylor de $1/\lambda$ quitte à générer d'avantage de branches à chaque collision (selon la stratégie de J. Dauchet 4.1.2).

Actuellement nous n'envisageons le développement d'un code basé sur cette proposition que dans une seconde phase, après avoir traité la question de la gestion des frontières avec la "marche mésoscopique". Cette question est encore trop récente, notre proposition reste actuellement théorique et nécessite un approfondissement plus poussé : par exemple, en commençant par évacuer les difficultés liées à la non-linéarité $\lambda(T)$ pour concentrer nos efforts sur la marche mésoscopique (pour l'instant Stardis est pensé selon une "marche macroscopique"). On envisage alors un travail similaire à celui réalisé en thermique linéaire, avec la marche macro sur δ -sphere : exploration systématique de la plage de praticabilité industrielle, adaptation locale de la longueur du pas, gestion des différentes conditions aux limites, ... Ce travail doit être fait dans la lenteur, avec méthode afin d'anticiper toutes les difficultés à venir. Une fois ce travail achevé, le codage de notre stratégie dans Stardis sera immédiat et si tout se passe bien en thermique linéaire (avec la marche mésoscopique), alors tout nous permet de penser que ce sera le cas en thermique non-linéaire $\lambda(T)$.

- Concernant la capacité calorifique variable $C(T)$, nous n'avons réalisé aucune mise en œuvre car on imagine mal réaliser un calcul en $C(T)$ sans considérer du $\lambda(T)$ et puisqu'il nous reste encore un travail important à réaliser en $\lambda(T)$ l'étude de cette non-linéarité $C(T)$ n'est pas la priorité. Elle le deviendra lorsque le travail sera plus mûr en $\lambda(T)$.
- En revanche pour le coefficient de convection variable $h(T)$ rien n'a été testé non plus, mais cette fois-ci ce n'est que par manque de temps. La prise en compte de cette non-linéarité semble être immédiate (via l'emploi d'un ACN à la frontière) et peut être implémentée en conservant la marche sur δ -sphere. On n'entrevoit aucune difficulté liée au passage à l'échelle et le codage dans Stardis pourrait être envisagé dans un futur proche.

Contrairement aux deux perspectives annoncées précédemment (et détaillées ci-après), la méthode de Monte-Carlo Picard que nous proposons conserve toutes les propriétés intéressantes de Monte-Carlo Linéaire :

- possibilité de coupler différentes physiques : nous avons vu que le couplage se traite de façon similaire à ce qui est proposé en thermique linéaire,
- insensibilité à la complexité géométrique : nous sommes convaincus que l'on retrouvera le même type d'insensibilité que celui observé par Najda Villefranque et Loris Ibarrart dans les Figures 1.5, 1.6 et 3.26.
- structure algorithmique similaire au cadre linéaire : à quelques récursivités près (à l'origine des branches), notre structure algorithmique est similaire à ce qui est actuellement codé en thermique linéaire.

Bien sûr, la différence majeure entre ce qui est fait en thermique linéaire et ce que nous proposons en thermique non-linéaire, réside dans le fait que nos chemins sont branchants et la conséquence sera inévitablement une augmentation du temps de calcul.

En revanche, cette augmentation sera indépendante de la complexité géométrique : si on multiplie par 100 le nombre de facettes nécessaire à la description de la géométrie CAO du Stanford Bunny (Figure 1.1a), alors les temps de calcul resteront inchangés. On peut comprendre cette insensibilité de la façon suivante : si on fait abstraction des branches générées le long de nos chemins, on constate qu'ils sont échantillonnés de façon similaire à ceux issus de la physique linéaire. De la même façon, ce raisonnement s'applique à chaque branche générée. Finalement, à cette augmentation du temps de calcul près, Monte-Carlo Picard hérite d'une insensibilité à la complexité géométrique similaire à celle associée à Monte-Carlo Linéaire.

6.3 Deux stratégies sans approximation qui ouvrent des perspectives...

Le travail sur le développement des deux stratégies pour éviter l'explosion du nombre de branches sans approximation, s'il n'est pas allé jusqu'au bout d'un algorithme applicatif à ce jour, ouvre des pistes de travail pour le futur. Le lecteur intéressé par la mise en œuvre de ces stratégies trouvera les détails dans les sections 7.1 et 7.2. Nous en exposons ici le principe.

1. La transformation de Kirchhoff

Nous avons bien sûr rencontré des exposés de travaux dans la littérature explorant la possibilité de changer de variables pour transformer un problème initial de thermique non-linéaire en un problème linéaire, face auquel on peut ensuite déployer les techniques de Monte Carlo usuelles. Il ne fait aucun doute que ces pistes de travail méritent une exploration continue, soit dans le but de parvenir effectivement à une traduction linéaire, soit dans le but de proposer une traduction imparfaite (le problème resterait non-linéaire) mais posant moins de difficultés : un changement de variable nous "rapprochant" du linéaire, réduisant par exemple le nombre de branchements. Nous avons alors rencontré deux exemples qui nous semblent représentatifs des perspectives offertes par de telles approches : un exemple radiatif très simple qui illustre la démarche et un exemple conductif, avec la transformation de Kirchhoff, auquel il nous semble important de garder une place dans les directions de recherche à venir.

- (a) Pour la transformation associée au rayonnement (section 7.1.1), il s'agit de remplacer la variable T par une nouvelle variable $y = T^4$. Le problème devient alors linéaire en y , la mise en œuvre est immédiate, simple à coder et extrêmement

efficace. En revanche, elle est très rapidement limitée lorsque l'on considère un problème instationnaire, un couplage avec d'autres transferts ou encore des propriétés spectrales.

- (b) Pour la transformation de Kirchhoff en conduction stationnaire (section 7.1.2), on retrouve le même comportement et la même conclusion qu'en rayonnement : il existe un changement de variable qui rend le problème linéaire, il est très efficace en conduction pure avec condition de Dirichlet et Neumann, mais encore une fois, cette stratégie est très rapidement limitée lorsque l'on considère des couplages : les conditions de raccordement conducto-radiative et conducto-convective semblent être plus compliquées à gérer, le changement de variable étant adapté à la physique de champ et pas à celle de frontière.

Ce travail d'exploration est engagé, aucune piste applicative n'est envisageable au stade actuel, mais il y a un réel espoir de parvenir à réduire le nombre de branchements, voire de l'annuler. En effet, dans les deux cas (rayonnement et conduction) la difficulté principale est celle du raccord avec une autre physique à la frontière. En évacuant la non-linéarité d'un mode de transfert dans le champ, avec un changement de variable adapté, on la reporte à la frontière, au moment du couplage. C'est donc à ce stade que les algorithmes deviendraient branchants. Le bénéfice n'est donc pas immédiat. Par contre nous avons commencé par un premier exemple simple, au stationnaire, où la question se ramène à une non-linéarité de type polynomiale, et il nous semble envisageable de la gérer sans branchement. Il s'agirait alors du premier exemple de MCNL sans essaim et sans branchement. Nous ne sommes pas parvenus au bout de cette démonstration, mais nous lui laissons une place dans nos perspectives car il s'agit d'une piste que nous allons poursuivre activement.

2. Reformulation intégrale en rayonnement

Dans le même esprit, nous avons toujours gardé en tête la perspective de produire un algorithme de MC exact avec branchements si nécessaire pour la prise en compte de la non-linéarité du rayonnement thermique. Dans la littérature nous n'avons rien identifié de pertinent (en dehors de l'approche en essaim) et même d'un point de vue purement théorique, il n'y a que via un développement de Picard et en tronquant, donc en perdant l'exactitude, que nous avons pu atteindre des algorithmes praticables en toute circonstance. Mais la perspective reste ouverte.

En effet, partant du constat que l'algorithme exact exposé dans la section 4.3 génère énormément de branches, menant à une impraticabilité même dans des géométries très simples, nous avons observé qu'il était possible d'utiliser une technique de reformulation intégrale menant à un algorithme, que nous appelons *Branching Algorithm* dans la section 7.2, qui reste branchant, mais qui cette fois-ci "branche" beaucoup moins, tellement moins que la mise en œuvre devient envisageable même en géométrie complexe.

A notre connaissance, c'est le premier algorithme de Monte-Carlo sans essaim, permettant de résoudre un problème de transfert thermique non-linéaire instationnaire conducto-radiatif de façon exacte. Malheureusement, durant notre étude nous avons pu constater de nombreuses configurations où cet algorithme génère une infinité de branches. C'est la raison pour laquelle nous ne présentons cet algorithme qu'en tant que perspective, conservant Monte-Carlo Picard comme seule proposition envisageable pour un passage à l'échelle à court ou moyen terme.

En revanche, dans son domaine de validité, cet algorithme est directement utilisable en géométrie complexe via l'emploi des outils de la communauté de la synthèse d'image, comme illustré dans la Figure 7.3. Ce travail, même si il reste embryonnaire, permet donc d'imaginer de nombreuses perspectives, notamment en y adaptant la stratégie de MCP. L'algorithme ne serait plus exact, mais ses performances seraient peut-être supérieures à celle du Chapitre 4.3.

Pour conclure sur l'annonce de ces deux perspectives, rappelons que toutes les bonnes propriétés propre à MCL seraient perdues si l'on envisageait l'une ou l'autre en termes applicatifs sans un travail supplémentaire. Les différents changements de variable que nous avons explorés jusqu'ici gomme effectivement la non-linéarité dans le champ, mais en contre partie, renvoient toute la difficulté à la frontière, difficulté que nous ne savons pas traiter actuellement même si la proposition que nous ferons au paragraphe 7.1.3 nous semble être une piste très sérieuse.

6.4 Une perspective complémentaire : MCP et le calcul des sensibilités

Notre outil étant à destination des thermiciens, pour les accompagner dans des phases de compréhension et de "dimensionnement" des mécanismes de transferts, une question devient centrale dans notre travail : le calcul des sensibilités. Cet outil est capital en sciences de l'ingénieur pour mieux comprendre et analyser le système physique.

Au cœur de notre proposition de MCP, les algorithmes à collisions nulles sont la brique essentielle sur laquelle l'ensemble de nos travaux repose. Pour cette raison, nous avons commencé par étudier le calcul des sensibilités en concentrant nos efforts sur les ACN et en laissant de côté les non-linéarités physiques. Ce travail a été publié dans [69], et nous le rappelons dans la section 7.3. Nous n'avons malheureusement pas travaillé la question de l'adaptation des algorithmes correspondant à Monte-Carlo Picard, mais nous pouvons déjà préciser que la difficulté va passer par la prise en compte de la dépendance du coefficient d'extinction $k(T)$ à la grandeur comme l'a constaté G. Terrée dans [20].

En revanche, des travaux très récents, menés par Victor Gattepaille au sein de l'Université de Clermont-Ferrand à l'Institut Pascal, motivés par des préoccupations industrielles relevant du génie des procédés, ont abordé la même question. Ils se sont intéressés à une physique non-linéaire (quatre physiques linéaires couplées non-linéairement) qu'ils ont traitée via une hiérarchie (qui émerge de la physique) similaire à la nôtre (dans notre cas, la hiérarchie émerge de contraintes numériques selon la méthode de Picard). En s'appuyant sur notre proposition 7.3 ils ont proposé une technique astucieuse permettant le calcul des sensibilités qu'ils publieront très prochainement (la thèse de V. Gattepaille est en cours d'écriture). Il nous reste donc à comprendre leur proposition, et voir si on peut l'utiliser pour répondre à notre question.

Chapitre 7

Perspectives

7.1 Changement de variable en thermique non-linéaire

Dans cette perspective, nous nous sommes intéressés aux techniques de changement de variable en conduction $\lambda(T)$ (section 7.1.2) dans le but de linéariser le transfert sans approximation.

Nous commençons par introduire le principe de cette technique via l'étude d'un changement de variable bien connu en rayonnement, décrit dans [92], permettant de gommer la non-linéarité en σT^4 dans le cas d'un transfert radiatif pur (sans aucun couplage), dans une cavité fermée, au stationnaire, avec des conditions de bord de type Dirichlet ou adiabatiques (section 7.1.1). Dans cette configuration, tout le problème se dit en T^4 et l'idée du changement de variable est "directe" : on considère la grandeur $y = T^4$. Le modèle associé à y est linéaire et nous pouvons estimer y via un algorithme de Monte-Carlo. Il n'est ensuite pas très compliqué de remonter à l'estimateur de T . Même si cette méthode est limitée au transfert radiatif stationnaire, sans couplage, elle reste très intéressante sur le plan théorique car c'est actuellement la seule façon de gérer la non-linéarité radiative σT^4 via un algorithme de Monte-Carlo non branchant.

Nous nous sommes ensuite concentrés sur le transfert par conduction (section 7.1.2) et avons introduit le changement de variable appelé "transformation de Kirchhoff" [93] qui est connu pour être limité aux conditions aux limites de type Dirichlet et Neumann au stationnaire. Il consiste à considérer la grandeur $v = \Lambda(T)$ où Λ est une primitive de la conductivité par rapport à la température. Le problème en v devient linéaire et nous pouvons estimer v via un algorithme de Monte-Carlo de façon similaire à ce qui est fait en rayonnement. La conséquence de ce changement de variable est le report de la non-linéarité du champ aux frontières, en combinant non-linéairement v et T ; et la difficulté principale réside dans la question du couplage entre les différents transferts de chaleur.

Partant du constat que les grandeurs v et T sont combinées de façon non-linéaire à la frontière, nous proposons, dans la section 7.1.3, une stratégie qui nous semble être une piste très sérieuse pour envisager ce couplage, *en créant une façon de passer de la variable v à la température T* . L'idée repose sur une technique de résolution par un algorithme de Monte-Carlo d'une équation polynomiale non-linéaire décrite dans la Proposition 1. Nous

utilisons cette structure polynomiale bien particulière¹ pour la transformer en un système d'équations linéaires de taille infinie, puis en une chaîne de Markov. La résolution par Monte-Carlo consiste alors à se déplacer sur le graphe associé (sans branchement) jusqu'à atteindre une valeur prescrite. Le travail restant à réaliser consiste à faire rentrer l'équation en v et T dans ce cadre particulier.

7.1.1 Changement de variable en rayonnement

Il est connu qu'en transfert radiatif pur (sans aucun couplage), dans une cavité fermée, stationnaire, avec des conditions de bord de type Dirichlet ou adiabatiques, avec des parois noires, qu'il est possible d'estimer par un algorithme de Monte-Carlo Linéaire la température en un point d'une paroi via un changement de variable.

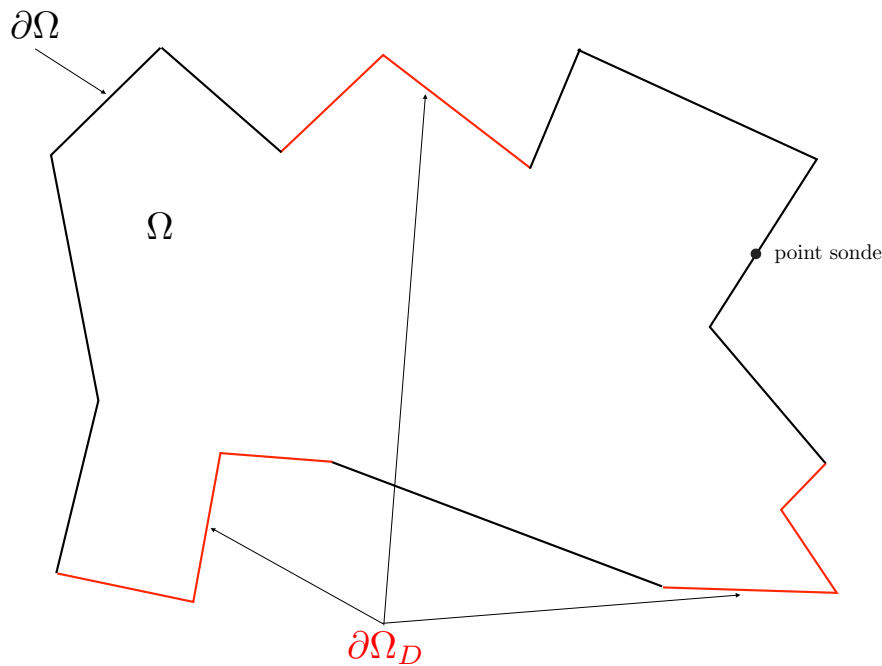


FIGURE 7.1 – Cavité où la température est imposée aux parois rouge à $T_{\partial\Omega_D}$, les autres parois sont adiabatiques.

Le modèle associé à une telle cavité s'écrit,

$$\begin{cases} 0 = \sigma \left(T(\vec{x})^4 - \mathbb{E}_\Gamma \left(T(\vec{x}_\Gamma)^4 \right) \right), & \vec{x} \in \partial\Omega \setminus \partial\Omega_D \\ T(\vec{x}) = T_{\partial\Omega_D}(\vec{x}), & \vec{x} \in \partial\Omega_D \end{cases} \quad (7.1)$$

La première équation correspond à l'égalité du flux (flux nul) et la seconde correspond à une condition de Dirichlet (parois noires à la température $T_{\partial\Omega_D}$ connue). En considérant le changement de variable $y = T^4$, on écrit,

$$\begin{cases} y(\vec{x}) = \mathbb{E}_\Gamma (y(\vec{x}_\Gamma)), & \vec{x} \in \partial\Omega \setminus \partial\Omega_D \\ y(\vec{x}) = T_{\partial\Omega_D}(\vec{x})^4, & \vec{x} \in \partial\Omega_D \end{cases} \quad (7.2)$$

1. où la somme des modules des coefficients est majoré par 1, chaque coefficient pouvant être considérés comme une probabilité

L'algorithme de Monte-Carlo associé à y consiste à réaliser un grand nombre d'échantillonnages de Γ , récupérer comme poids de MC la température à la puissance quatre au bout de ces chemins², puis réaliser la moyenne arithmétique de ces différents poids.

L'estimateur de y est donc $Y_n = 1/n \sum_{i=1}^n T(\vec{x}_{\Gamma_i})^4$ où n est le nombre d'échantillonnages et $(\Gamma_i)_{i \in \{1, \dots, n\}}$ une suite de variables aléatoires i.i.d suivant Γ , un intervalle de confiance au risque 66% de y étant $y \in [y_n - \sigma_{Y,n}, y_n + \sigma_{Y,n}]$ où y_n est une réalisation de Y_n et $\sigma_{Y,n}$ l'écart-type associée.

Finalemt, en utilisant la relation $T = y^{1/4}$, l'estimateur de T n'est rien d'autre que $Y_n^{1/4}$. Pour construire la barre d'erreur associée à T , nous utilisons la propriété de stricte croissance de la racine quatrième $x \mapsto x^{1/4}$ et nous en déduisons un intervalle de confiance au risque 66% pour la température T :

$$T \in [(y_n - \sigma_{Y,n})^{1/4}, (y_n + \sigma_{Y,n})^{1/4}] \quad (7.3)$$

En effet, on a ,

$$\begin{aligned} 66\% &= \mathbb{P}_{Y_n} (Y_n - \sigma_{Y_n} \leq y \leq Y_n + \sigma_{Y_n}) \\ &= \mathbb{P}_{Y_n} \left((Y_n - \sigma_{Y_n})^{1/4} \leq y^{1/4} \leq (Y_n + \sigma_{Y_n})^{1/4} \right), \quad \text{car } x \mapsto x^{1/4} \text{ est strictement croissante} \\ &= \mathbb{P}_{Y_n} \left((Y_n - \sigma_{Y_n})^{1/4} \leq T \leq (Y_n + \sigma_{Y_n})^{1/4} \right) \end{aligned} \quad (7.4)$$

7.1.2 Transformation de Kirchhoff

La transformation de Kirchhoff consiste à utiliser un changement de variable dans le but de transformer un problème conductif avec une conductivité dépendante de la température en un problème conductif linéaire, et ceci, de façon similaire à la méthode décrite précédemment en transfert radiatif. Comme pour le rayonnement, l'équation considérée est stationnaire, les conditions aux bords pouvant être considérées sont de type Dirichlet et/ou Neumann. Le modèle de transfert résultant s'écrit,

$$\begin{cases} 0 = -\operatorname{div} \left(-\lambda(T) \vec{\nabla} T \right) , & \vec{x} \in \Omega \\ T(\vec{y}) = T_{\partial\Omega}(\vec{y}) , & \vec{y} \in \partial\Omega_D \\ -\lambda(T) \vec{\nabla} T(\vec{y}) \cdot \vec{n} = \psi(\vec{y}) , & \vec{y} \in \partial\Omega_N \end{cases} \quad (7.5)$$

où λ est la conductivité thermique dépendante de la température, Ω le domaine solide, de bord $\partial\Omega$, $T_{\partial\Omega}$ la température imposée sur le bord du domaine $\partial\Omega_D$ et ψ une densité de flux surfacique, le changement de variable considéré est le suivant,

$$v := \Lambda(T) \quad (7.6)$$

2. L'échantillonnage d'un chemin consiste à échantillonner un chemin optique γ suivant Γ , partant du point \vec{x} et atteignant une frontière en un point \vec{x}_γ où la température est connue. Le long du chemin, la trajectoire a pu atteindre une ou plusieurs fois des parois où la température n'est pas prescrite. Dans ces cas là (la condition de bord est de type adiabatique), le chemin continue sa trajectoire comme si il était à nouveau échantillonné depuis ce point (via le principe de double randomisation).

où Λ est une primitive de la conductivité par rapport à la température (par exemple, si $\lambda(T) = aT + b$ alors on peut considérer $v = \Lambda(T) = \frac{a}{2}T^2 + bT$). Pour un tel choix de v , on a $\vec{\nabla}v = \lambda(T)\vec{\nabla}T$. En utilisant l'Eq. (7.5), on en déduit que v vérifie :

$$\begin{cases} 0 = -\operatorname{div}(-\vec{\nabla}v) & , \quad \vec{x} \in \Omega \\ v(\vec{y}) = v_{\partial\Omega}(\vec{y}) & , \quad \vec{y} \in \partial\Omega_D \\ -\vec{\nabla}v(\vec{y}) \cdot \vec{n} = \psi(\vec{y}) & , \quad \vec{y} \in \partial\Omega_N \end{cases} \quad (7.7)$$

où $v_{\partial\Omega} = \Lambda(T_{\partial\Omega})$. Ainsi, il est clair que v est solution de l'équation de la chaleur linéaire stationnaire avec une condition de type Dirichlet et/ou Neumann.

L'algorithme de Monte-Carlo Linéaire 11 présenté dans le Chapitre 3 est donc efficace pour évaluer une estimation de la grandeur v solution de l'Eq. (7.7) et nous noterons V la v.a associée : l'estimation de v est notée v_n et est échantillonnée de la façon suivante,

$$v_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n v_i \quad (7.8)$$

où $(v_i)_{i \in \{1, \dots, n\}}$ sont n réalisations indépendantes et identiquement distribuées suivant V .

Une fois la grandeur v estimée, il devient nécessaire de trouver une stratégie permettant d'exprimer T en fonction de v . Pour cela, la première façon de procéder est d'utiliser la fonction inverse de Λ . En effet, puisque $v := \Lambda(T)$, alors $T = \Lambda^{-1}(v)$ (la fonction inverse Λ^{-1} est bien définie car la conductivité λ étant strictement positive, sa primitive Λ est strictement croissante et donc inversible). Malheureusement, la fonction Λ^{-1} n'est pas linéaire (en toute généralité) et par conséquent, il n'est pas possible de considérer la quantité $1/n \sum_{i=0}^n \Lambda^{-1}(v_i)$ comme une estimation de T car

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \Lambda^{-1}(v_i) \neq \Lambda^{-1}(v_n) \quad (7.9)$$

lorsque Λ^{-1} est non-linéaire. A ce stade, il y a deux solutions pour construire cet estimateur :

- Premièrement, remplacer Λ^{-1} par un développement en série entière comme expliqué dans la section 4.1.2.
- Deuxièmement, utiliser la même astuce que celle présentée en rayonnement i.e la propriété de stricte croissance de la fonction Λ^{-1} et ainsi construire comme estimation de la température $\Lambda^{-1}(v_n)$, et l'intervalle de confiance au risque 66% : $T \in [\Lambda^{-1}(v_n - \sigma_{v_n}), \Lambda^{-1}(v_n + \sigma_{v_n})]$

La transformation de Kirchoff permet ainsi de reporter la non-linéarité présente dans le champ aux frontières, où les grandeurs v et T sont mises en relation via une fonction non-linéaire qui nous empêche d'envisager le couplage avec les autres transferts : convectif³ et radiatif. Nous présentons dans la section suivante, une piste que l'on envisage pour contourner cette non-linéarité.

3. Des travaux récents ont abordés la question du couplage conducto-convectif dans [94] via une approximation.

7.1.3 Vers le couplage

Nous proposons ici, une technique astucieuse pour résoudre une équation polynomiale non-linéaire décrite dans la proposition 1, via un algorithme de Monte-Carlo. L'idée, qui n'est encore qu'à l'état de perspective, consisterait à utiliser cette méthode pour étendre la praticabilité de la transformation de Kirchhoff au couplage via un algorithme de Monte-Carlo non branchant.

Résolution d'une équation polynomiale non-linéaire par MC

Proposition 1

Soit un $n \in \mathbb{N}^*$ un entier et $P_n \in \mathbb{R}[x]$ un polynôme de degré n tel que :

$$P_n(x) = b + (a_1 - 1)x + \sum_{i=2}^n a_i x^i \quad (7.10)$$

Si $|b| + \sum_{i=1 \dots n} |a_i| < 1$, alors P_n admet une unique racine réelle dans $] - 1, 1[$.

Démonstration : L'existence de la racine repose sur une conséquence immédiate du théorème de Brouwer. L'unicité (et l'existence) est une conséquence de l'exercice 58 "Point fixe et fonctions holomorphes" de [88]. D'où le résultat. ■

Pour déterminer cette racine, nous proposons d'utiliser un algorithme de Monte-Carlo. Pour cela, nous commençons par remarquer la trivialité suivante,

$$\begin{aligned} P_n(x) &= 0 \\ \Leftrightarrow x &= b + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + a_n x^n \end{aligned} \quad (7.11)$$

puis on remplace cette équation non-linéaire (7.11) par un système d'équations linéaires de taille infinie équivalent :

$$\begin{cases} x = b + 1 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_{n-1} x_{n-1} + a_n x_n + e.0 \\ x_2 = b x + a_1 x_2 + a_2 x_3 + \dots + a_{n-1} x_n + a_n x_{n+1} + e.0 \\ x_3 = b x_2 + a_1 x_3 + a_2 x_4 + \dots + a_{n-1} x_{n+1} + a_n x_{n+2} + e.0 \\ x_4 = b x_3 + a_1 x_4 + a_2 x_5 + \dots + a_{n-1} x_{n+2} + a_n x_{n+3} + e.0 \\ \dots \end{cases} \quad (7.12)$$

où l'on note $x_i = x^i$ pour tout entier $i \in \mathbb{N}^*$ et e est choisi tel que $1 = e + |b| + \sum_{i=1 \dots n} |a_i|$.

Pour résoudre ce système par MC, nous utilisons l'hypothèse $|b| + \sum_{i=1 \dots n} |a_i| < 1$ et construisons la chaîne de Markov infinie. Pour simplifier, nous commençons par supposer que les coefficients b et a_i pour tout $i \in 1 \dots n$ sont positifs. Dans ce cas, la chaîne de Markov est représentée par le schéma suivant :

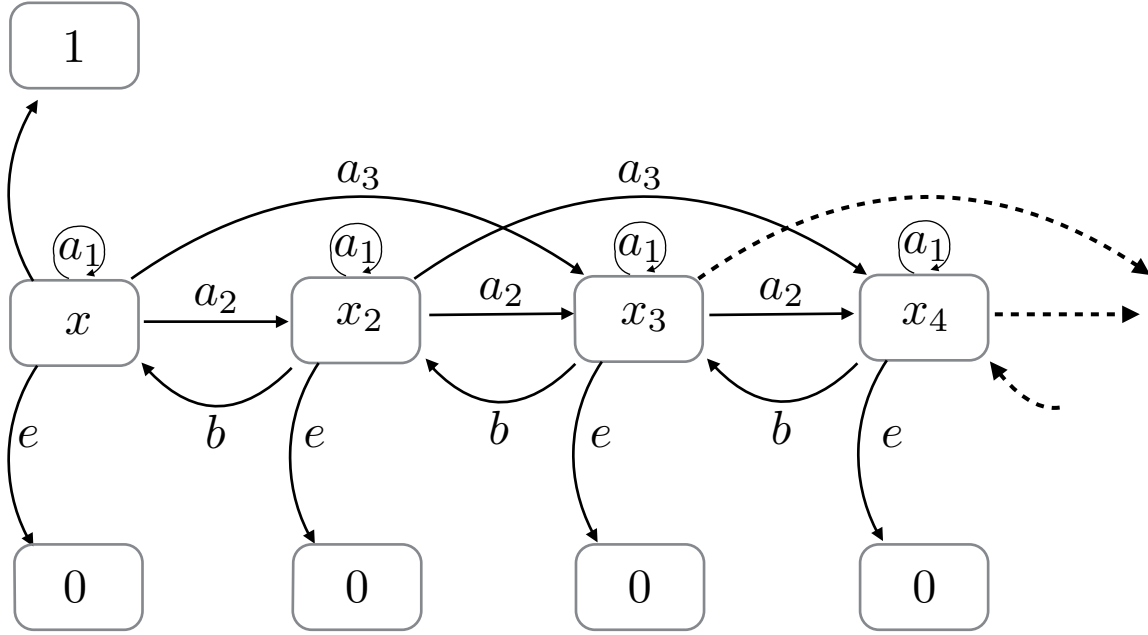


FIGURE 7.2 – Chaîne de Markov associée au polynôme.

L'algorithme de Monte-Carlo associé consiste à récupérer comme poids de Monte-Carlo 1 avec la probabilité b , x avec la probabilité a_1 , x_2 avec la probabilité a_2 , x_3 avec la probabilité a_3 et 0 avec la probabilité e . Si la réalisation vaut 1 ou 0 l'échantillonnage est terminé, sinon il devient nécessaire d'échantillonner x_i en répétant la même procédure : on récupère comme poids de Monte-Carlo x_{i-1} avec la probabilité b , x_i avec la probabilité a_1 , x_{i+1} avec la probabilité a_2 , x_{i+2} avec la probabilité a_3 et 0 avec la probabilité e . Les poids de Monte-Carlo pouvant être retournés sont 1 et 0 (l'estimateur ne pouvant être qu'à valeurs dans $[0, 1]$).

Si maintenant on considère des coefficients de signes quelconques, alors l'algorithme reste le même, et les signes sont reportés dans le poids de Monte-Carlo. Les réalisations seront donc à valeurs dans $\{-1, 0, 1\}$.

Lien avec la transformation de Kirchhoff

Considérons un matériau où la conductivité peut être considérée polynomiale en la température $\lambda(T) = a_1 + a_2T + \dots + a_nT^{n-1}$. Dans ce cas, $v = \Lambda(T) = b + a_1T + a_2/2T^2 + \dots + a_n/nT^n$. Pour échantillonner T , l'idée est d'appliquer la proposition précédente à l'équation,

$$T = -v + (a_1 - 1)T + \frac{a_2}{2}T^2 + \dots + \frac{a_n}{n}T^n \quad (7.13)$$

Puisque nous savons évaluer une réalisation de V associée à v (voir transformation de Kirchhoff), il ne reste plus qu'à trouver un moyen de faire rentrer cette équation dans le cadre de la proposition 1. Pour cela on envisage d'utiliser à nouveau un changement de variable pour contraindre le champ de température dans l'intervalle $[0, 1]$ et ensuite on s'occupera de borner les coefficients.

De la même façon, le couplage avec les transferts convectif et conductif, qui a lieu à la frontière, met en relation v et T de façon non-linéaire. La question sera à nouveau de faire

rentrer cette non-linéarité dans le cadre de la proposition 1. Nous n'avons pas eu le temps de travailler cette question mais pensons qu'elle mérite réflexion.

7.2 Méthode de Monte-Carlo exacte pour le Rayonnement en σT^4

Dans cette section nous donnons le texte d'un article en cours d'écriture qui présente un algorithme de Monte-Carlo exact traitant du transfert radiatif non-linéaire σT^4 avec un couplage conducto-radiatif⁴ instationnaire.

Nous avons déjà proposé un tel algorithme dans la section 4.3 (Algorithme 24-25) et avons constaté une explosion du nombre de branches à faible Knudsen. L'idée ici est de proposer un algorithme alternatif dans le but de repousser cette limite.

Cet algorithme est établi⁵ à partir de la continuité du flux à l'interface solide, où nous considérons un effet capacitif surfacique pour faciliter l'emploi de la technique des ACN (cet effet capacitif n'est pas nécessaire). Ensuite via un travail de reformulation intégrale astucieux, nous faisons en sorte que les poids de Monte-Carlo pouvant être retenus soient systématiquement positifs et majorés par la température maximale du système. Cette majoration est essentielle, car elle nous permet de faire émerger des v.a de Bernoulli de paramètre aléatoire $p(\Theta)$ où $T = \mathbb{E}_\Theta(\Theta)$, similaires à celles considérées dans les Chapitres 4 et 5. Sans cette majoration, nous ne pouvons pas garantir que les réalisations associées à $p(\Theta)$ soient à valeur dans l'intervalle $[0, 1]$. Cet algorithme reste branchant, mais il branche moins que l'algorithme établi dans la section 4.3. La Figure 7.3 montre un résultat de sa mise en oeuvre en géométrie complexe.

4. la convection n'est pas considérée ici, mais elle n'est en aucun cas source de difficulté

5. Cet algorithme peut également être obtenu à partir d'une reformulation intégrale de l'équation (4.50), établie dans la section 4.3, page 130 (voir Annexe 5.17)

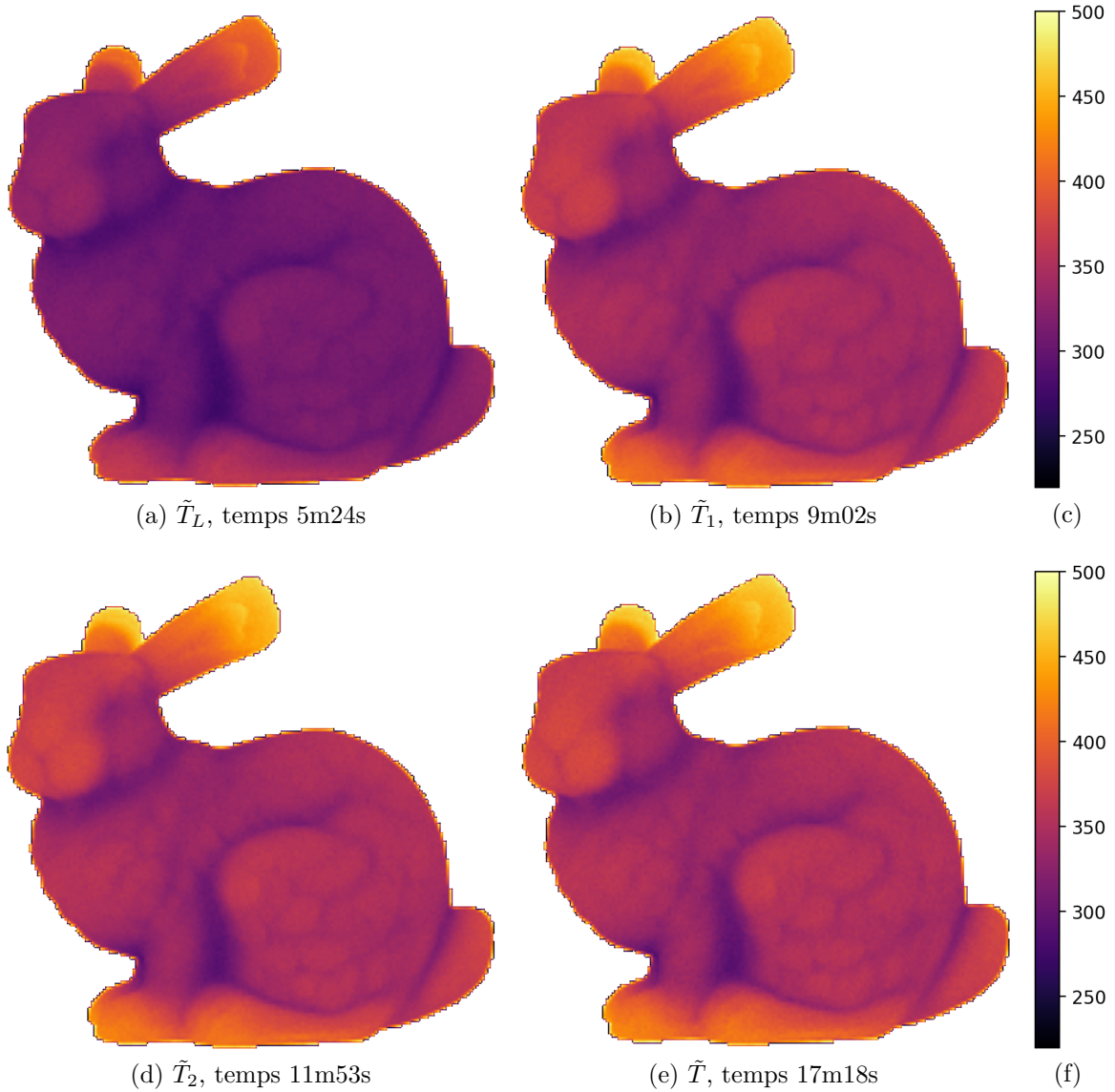


FIGURE 7.3 – Résultats obtenus dans la géométrie Stanford Bunny 1.1a, en prenant en compte les transferts de chaleur conductif et radiatif en instationnaire. Nous considérons une température initiale $T_I = 200K$, une température radiative environnante uniforme de $500K$, une conductivité $\lambda = 5$, une densité $\rho = 1$, une capacité calorifique $C = 1$, un temps d’observation $t = 0.005s$ et une température de référence $T_{ref} = 250K$. Résultats obtenus à partir de l’Algorithme disponible dans [89] en considérant 4096 réalisations par pixels pour \tilde{T}_L , \tilde{T}_1 , \tilde{T}_2 et \tilde{T} . Les itérations supérieures à deux ne sont pas présentées ici car elles coïncident avec \tilde{T}_2 et \tilde{T} .

Bien sûr, cet algorithme reste limité à des géométries de faible concavité et à de faibles variations de la température. Il reste donc en l’état de perspective contrairement à notre proposition de Monte-Carlo Picard.

TRANSIENT CONDUCTO-RADIATIVE HEAT TRANSFER IN A SINGLE MONTE-CARLO ALGORITHM: HANDLING THE NONLINEARITY

J-M. Tregan,^{3,*} S. Blanco,³ C. Caliot,¹ J. Dauchet,² M. El Hafi,⁴ V. Eymet,⁸ R. Fournier,³ O. Farges,⁵ J. Gautrais,⁷ M. Roger⁶

¹ PROMES - UPR CNRS 8521 - 7, rue du Four Solaire, 66120 Font Romeu Odeillo, France

² Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

³ LAPLACE, UMR 5213 - Université Paul Sabatier, 118, Route de Narbonne - 31062 Toulouse Cedex, France

⁴ Laboratoire RAPSODEE - UMR 5302 - ENSTIMAC - Campus Jarlard - 81013 Albi CT Cedex 09, France

⁵ LEMTA - UMR 7563 - Université de Lorraine, Vandœuvre-lès-Nancy, France

⁶ Univ Lyon, CNRS, INSA-Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CETHIL UMR5008, F-69621, Villeurbanne, France

⁷ Centre de Recherches sur la Cognition Animale (CRCA), Centre de Biologie Intégrative (CBI), CNRS, Université de Toulouse (UPS), F-31062, Toulouse Cedex 9

⁸ Mésos-Star - 8 rue des Pêcheurs, 31410 Longages

ABSTRACT. It was recently shown that the Green formulation of transient coupled heat transfer could be turned into a Monte-Carlo algorithm that addresses the solution in a direct manner, without iterating between the modes, i.e. sampling heat-transfer paths that combine conduction, convection and radiation at the lower level. The main benefit of such an approach is that the temperature at a given location and a given time can be evaluated without constructing the whole temperature field. There is a strong similarity with standard radiative transfer Monte-Carlo algorithms that evaluate the specific intensity at a given location and in a given direction without constructing the whole intensity field (backward tracking of a radiative path from the observation location to the radiative sources). Here, heat-transfer paths are tracked backwards in both time and space, allowing a straightforward use of computer graphics tools developed for the cinema industry for the evaluation of temperature inside complex industrial geometries. However, as Green formalism is used from the start, this method is limited to linearised heat-transfer, notably to limited temperature differences, so that radiative transfer can be linearised around a reference temperature. We here propose a new branching-path sampling approach that bypasses this constraint. The formal developments are provided and some attempts at implementation are reported for academic conducto-radiative configurations, leading to a first-level discussion of this observed numerical behaviour in terms of both computation time and branching statistics.

*Corresponding J-M. Tregan: tregan@laplace.univ-tlse.fr

1. INTRODUCTION

When the heat-transfer problem is linear, the temperature Θ can be expressed using an integral formulation involving the Green function [1]. This integral formulation allows us to express the temperature as the expectation of a random variable: $\Theta = \int_{\mathcal{D}_W} p_W(w)dw$ $w = \mathbb{E}_W(W)$ where W is a random variable and p_W its probability density function. From this expectation, we can elaborate one Monte-Carlo algorithm to evaluate an estimate of temperature noted Θ_n using n independent samplings $w_i, i \in \{1, n\}$ of W : $\Theta_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i$. This algorithm is nothing more than the algorithmic reading of the integral formulation [2]. From this approach we will design a Monte-Carlo algorithm to evaluate the temperature solution of the following nonlinear transient coupled heat-transfer equation:

$$\begin{cases} \rho c \partial_t \Theta = -\text{div} \left(-\lambda \vec{\nabla} \Theta \right) & \text{in } \Omega \\ c_s \partial_t \Theta = \sigma \left(\Theta_R^4 - \Theta^4 \right) + \lambda \vec{\nabla} \Theta \cdot \vec{n} & \text{in } \partial\Omega \\ \Theta(\cdot, 0) = \Theta_0 & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} \quad (1)$$

where ρ is the density of the material, c the mass heat capacity, λ the conductivity, c_s the surface heat capacity, σ the Stefan-Boltzmann constant. The radiative temperature $\Theta_R \equiv \Theta_R(\vec{x}, t)$ at point \vec{x} at time t is defined such that $\Theta_R^4 = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma T(\vec{x}_\gamma)^4$ where \mathcal{D}_Γ is the space of all the radiative paths, p_Γ the density of probability of the radiative path reflecting the statistical pictures associated with the radiative-transfer equation, γ a radiative path and \vec{x}_γ the position at the end of the radiative path γ . $\Theta \equiv \Theta(\vec{x}, t)$ is the temperature at point \vec{x} at time t , Θ_0 the initial condition, Ω the solid domain, $\partial\Omega$ its boundary and \vec{n} the incoming normal. Here, the boundary conditions are not explained; they will be explained later with reference to the studied configuration.

In this Eq. (1) the two modes of heat transfer are conduction and radiation. Conduction is a linear heat transfer, thus the Green formulation is appropriate. Radiation is a nonlinear heat transfer, so it is difficult to use the Green formulation to obtain an expression of temperature under integral formulation. In the available literature, the main strategy is to linearise the radiation around a reference temperature (or to use a timestep using sampling source particles from all known source distributions: [3,4]). This makes the Green formulation practicable to design one Monte-Carlo algorithm that we call the *Linearized Algorithm*. Unfortunately, this linearization is not always valid [5]. We are therefore proposing a strategy to evaluate the temperature of Eq. (1) using an exact Monte-Carlo algorithm. The formal development of the integral formulation is provided in Section 2. The implementation of the algorithm has been carried out in several academic configurations. The results that allow us to validate the algorithm and identify its limits are given in Section 3.

2. ESTABLISHMENT OF THE INTEGRAL FORMULATION

It was recently shown, in linear-transport physics, that it is possible to handle highly non-homogeneous media using a null-collision algorithm (NCA). The main idea is to transform the non-linearity of Beer-extinction into a linear-recursive problem of infinite dimension that Monte Carlo handles without approximation [6–8]. The effectiveness of NCAs [9–20] leads us to elaborate one integral formulation of the temperature using the same strategy. For this, we consider a free parameter \hat{v} in order to write

Eq. (1) in a form adapted to NCA:

$$\begin{cases} \rho c \partial_t \Theta = -\text{div} \left(-\lambda \vec{\nabla} \Theta \right) & \text{in } \Omega \\ \partial_t \Theta = -\hat{\nu} \Theta + \hat{\nu} \Theta^* & \text{in } \partial \Omega \\ \Theta^* = \Theta - \alpha [\Theta^4 - \Theta_R^4] - p_C (\Theta - \Theta_\delta) & \text{in } \partial \Omega \\ \Theta(\cdot, 0) = \Theta_0 & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} \quad (2)$$

where $\alpha = \frac{\sigma}{c_s \hat{\nu}}$, $p_C = \frac{\lambda}{c_s \delta \hat{\nu}}$, δ is a spatial discretization parameter, Θ_δ the temperature at point $\vec{x} - \delta \vec{n}$, and \vec{n} the incoming normal of the solid domain Ω at point \vec{x} at time t . Using $p_T(t) = \hat{\nu} \exp(-\hat{\nu} t)$ on \mathbb{R}^+ we can express the temperature Θ under integral formulation:

$$\begin{aligned} \Theta(\vec{x}, t) &= \mathbb{E}_T (\mathcal{H}(T-t) \Theta_0(\vec{x}) + \mathcal{H}(t-T) \Theta^*(\vec{x}, t-T)) \\ \Theta(\vec{x}, t) &= \int_0^{+\infty} p_T(s) ds \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(s-t) \Theta_0(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t-s) \Theta^*(\vec{x}, t-s) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

where \mathcal{H} is the Heaviside function i.e. $\mathcal{H}(z) = 1$ if $z \geq 0$ and 0 in other cases. The integral formulation Eq.(3) is unusable algorithmically because Θ^* is not expressed under integral formulation. To bypass this difficulty, we consider a random variable W such that $\Theta = \mathbb{E}(W)$ where $W \equiv W(\vec{x}, t)$ is left undefined for the moment:

$$\Theta^* = \mathbb{E}_{W_1} \mathbb{E}_{W_2} \mathbb{E}_{W_3} \mathbb{E}_{W_4} \left(W_1 + \alpha \left(\begin{array}{l} \Theta_R^4 - W_1 \hat{\Theta}^3 + W_2 \hat{\Theta}^3 \\ -W_1 W_2 \hat{\Theta}^2 + W_2 W_3 \hat{\Theta}^2 \\ -W_1 W_2 W_3 \hat{\Theta} + W_2 W_3 W_4 \hat{\Theta} \\ -W_1 W_2 W_3 W_4 \end{array} \right) + p_C (\Theta_\delta - W_1) \right) \quad (4)$$

where W_1, W_2, W_3 and W_4 are random variables that are independent and distributed identically to W . We choose to confine the realizations of W between 0 and $\hat{\Theta}$. In this way, we obtained the following equation:

$$\Theta^* = \hat{\Theta} \left(\begin{array}{l} p_R \left(\frac{\Theta_R}{\hat{\Theta}} \right)^4 \\ + p_C \frac{\Theta_\delta}{\hat{\Theta}} \\ + (1 - p_R - p_C) \mathbb{E}_{W_1} \left(\underbrace{\left(\frac{W_1}{\hat{\Theta}} + \left(1 - \frac{W_1}{\hat{\Theta}} \right) \frac{p_R}{1 - p_R - p_C} \mathbb{E}_{W_2} \mathbb{E}_{W_3} \mathbb{E}_{W_4} \left(\frac{W_2}{\hat{\Theta}} + \frac{W_2 W_3}{\hat{\Theta}^2} + \frac{W_2 W_3 W_4}{\hat{\Theta}^3} \right) \right)}_{B_1} \right) \end{array} \right) \quad (5)$$

where $p_R = \alpha \hat{\Theta}^3$. From Eq. (5), we express B_1 under integral formulation choosing $\frac{p_R}{1-p_R-p_C} = \frac{1}{3}$ which implies $\hat{v} = \frac{4\delta\sigma\hat{\Theta}^3+\lambda}{c_s\delta}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} B_1 = \mathbb{E}_{W_1} \left(\frac{W_1}{\hat{\Theta}} + \left(1 - \frac{W_1}{\hat{\Theta}}\right) \underbrace{\mathbb{E}_{W_2} \mathbb{E}_{W_3} \mathbb{E}_{W_4} \left(\frac{\frac{W_2}{\hat{\Theta}} + \frac{W_2 W_3}{\hat{\Theta}^2} + \frac{W_2 W_3 W_4}{\hat{\Theta}^3} \right)}_3 \right) \\ B_2 = \mathbb{E}_{W_2} \left(\frac{W_2/\hat{\Theta}}{3} 1 + \frac{1-W_2/\hat{\Theta}}{3} 0 + \frac{2}{3} \mathbb{E}_{W_3} \mathbb{E}_{W_4} \left(\frac{\frac{W_2 W_3}{\hat{\Theta}^2} + \frac{W_2 W_3 W_4}{\hat{\Theta}^3} \right) \right) \\ B_3 = \mathbb{E}_{W_3} \left(\frac{W_2 W_3/\hat{\Theta}^2}{2} 1 + \frac{1-W_2 W_3/\hat{\Theta}^2}{2} 0 + \frac{1}{2} \mathbb{E}_{W_4} \left(\frac{W_2 W_3 W_4}{\hat{\Theta}^3} \right) \right) \end{array} \right. \quad (6)$$

where w_1, w_2, w_3, w_4 are independent realizations of W .

Then, we can express the temperature under integral formulation from Eqs. (5) and (6) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Theta(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_T(s) ds \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(s-t) \Theta_0(\vec{x}) \\ + \mathcal{H}(t-s) \Theta^*(\vec{x}, t-s) \end{array} \right\} \\ \Theta^* = \hat{\Theta} \int_0^1 dr_0 \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(r_0 < p_R) \int_{\Gamma} p_{\Gamma}(\gamma) d\gamma \left(\frac{\Theta(\vec{x}_{\gamma})}{\hat{\Theta}} \right)^4 \\ + \mathcal{H}(p_R < r_0 < p_R + p_C) \frac{\Theta_{\delta}}{\hat{\Theta}} \\ + \mathcal{H}(p_R + p_C < r_0) B_1 \end{array} \right) \\ B_1 = \int_{D_W} p_W(w_1) dw_1 \int_0^1 dr_1 \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}\left(r_1 < \frac{w_1}{\hat{\Theta}}\right) 1 \\ + \mathcal{H}\left(\frac{w_1}{\hat{\Theta}} < r_1\right) B_2 \end{array} \right) \\ B_2 = \int_{D_W} p_W(w_2) dw_2 \int_0^1 dr_2 \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}\left(r_2 < \frac{w_2/\hat{\Theta}}{3}\right) 1 \\ + \mathcal{H}\left(\frac{w_2/\hat{\Theta}}{3} < r_2 < \frac{1}{3}\right) 0 \\ + \mathcal{H}\left(\frac{1}{3} < r_2\right) B_3 \end{array} \right) \\ B_3 = \int_{D_W} p_W(w_3) dw_3 \int_0^1 dr_3 \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}\left(r_3 < \frac{w_2 w_3/\hat{\Theta}^2}{2}\right) 1 \\ + \mathcal{H}\left(\frac{w_2 w_3/\hat{\Theta}^2}{2} < r_3 < \frac{1}{2}\right) 0 \\ + \mathcal{H}\left(\frac{1}{2} < r_3\right) \int_{D_W} p_W(w_4) dw_4 \frac{w_2 w_3 w_4}{\hat{\Theta}^3} \end{array} \right) \end{array} \right. \quad (7)$$

where r_0, r_1, r_2, r_3 are independent realizations of a uniform variable on $[0, 1]$.

We define W by using the statistical reading of the integral formulation (7). By construction, the expectation of W is Θ . Moreover, the realizations of W are between 0 and $\hat{\Theta}$. Indeed, the possible realizations of W are: Θ_0 , $\left(\frac{\Theta(\vec{x}_{\gamma})}{\hat{\Theta}}\right)^4 \hat{\Theta}$, $\frac{\Theta_{\delta}}{\hat{\Theta}} \hat{\Theta}$, $\hat{\Theta}$, 0 and $\frac{w_2 w_3 w_4}{\hat{\Theta}^3} \hat{\Theta}$. Therefore, the couple $\left(\frac{w_1}{\hat{\Theta}}, 1 - \frac{w_1}{\hat{\Theta}}\right)$, and triplets $\left(\frac{w_2/\hat{\Theta}}{3}, \frac{1-w_2/\hat{\Theta}}{3}, \frac{2}{3}\right)$ and $\left(\frac{w_2 w_3/\hat{\Theta}^2}{2}, \frac{1-w_2 w_3/\hat{\Theta}^2}{2}, \frac{1}{2}\right)$, can be interpreted as probabilities and

we can deduce a Monte-Carlo algorithm (which is nothing more than the algorithmic reading of Eq. (7)) called a *Branching Algorithm*:

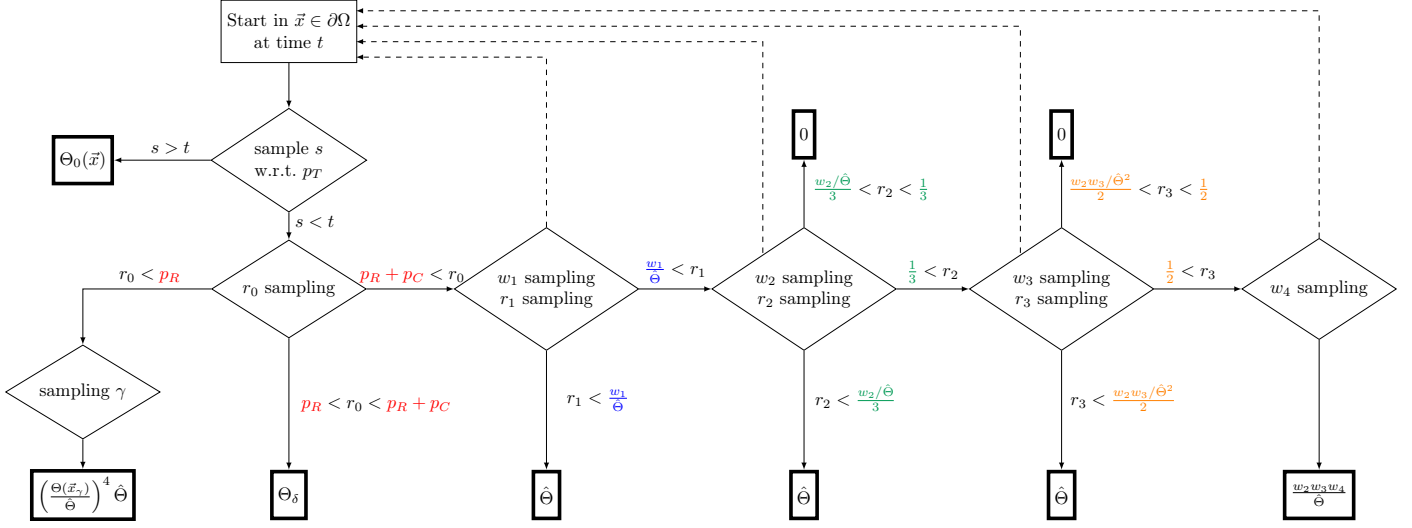


Figure 1. *Branching Algorithm*

3. RESULTS

Implementation was carried out on academic cases (Figure 2 and 3) in order to compare our results with analytical solutions. The results are provided in Tables 1 and 2. These results confirm that the *Branching Algorithm* (Figure (1)) is practicable. It can be observed that the error bars are of the same order of magnitude as the error bars in the *Linearized Algorithm*. This property is important because the convergence of the *Branching Algorithm* is only driven by the average branch number per path and the convergence speed of our algorithm is the same as in the *Linearized Algorithm*. Computation times for the *Branching Algorithm* t are proportional to the computation time of the *Linearized Algorithm* t_{lin} : $t = (N_b + 1)t_{lin}$ where N_b is the average branch number generated per path. Tables 1 and 2 allow us to identify the limits of the *Branching Algorithm* that are characterised by three kinds of branching:

- The first kind of branching depends on the boundary conditions. The probability value $\frac{w_1}{\Theta}$ depends on boundary conditions and the probability of a branching increases with the decrease of w_1 . This algorithmic feature produces a temperature asymmetry. For example in configuration 1, using $p = 0.25$ and $l/L = 1$, we can estimate the temperature for $x = 0.9l$, but not for $x = 0.1l$. In the same way, in configuration 2, we can estimate the temperature when $p > 0$ ($\Theta_0 < \Theta_1$), but not when $p < 0$ ($\Theta_0 > \Theta_1$).
- The second kind of branching results from the algorithm structure: the evaluation of boundary temperature (on the surface separating the solid from the cavity) automatically produces one branching with a probability $1 - p_R - p_C$. Therefore, if the sampling path crosses the boundary $\partial\Omega$ many times, then the algorithm generates a lot of branching and the algorithm is unusable: this is the case in configuration 3, where the radiative heat transfer is between two unknown surface temperatures.
- The third kind of branching is more classic: it appears when we have to evaluate the weight $\left(\frac{\Theta(\vec{x}_\gamma)}{\hat{\Theta}}\right)^4 \hat{\Theta}$ and when the temperature $\Theta(\vec{x}_\gamma)$ is unknown. Indeed, the temperature at point \vec{x}_γ

is only expressed in expectation form: $\Theta(\vec{x}_\gamma)^4 = \mathbb{E}_W(W(\vec{x}_\gamma))^4$. To bypass this non-linearity problem, we replace $\mathbb{E}_W(W)^4$ by $\mathbb{E}_{W_1}(W_1)\mathbb{E}_{W_2}(W_2)\mathbb{E}_{W_3}(W_3)\mathbb{E}_{W_4}(W_4)$ [13], which implies the generation of four branchings.

3.1 Configuration 1

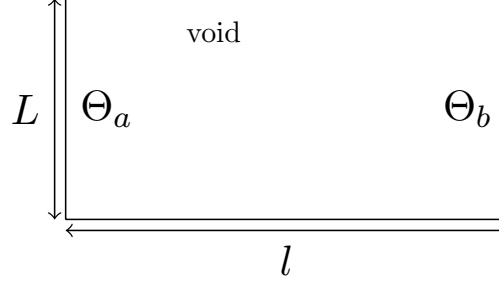


Figure 2. Rectangular cavity of length l and width L , where each face is a black body. The left and right faces are imposed at temperature Θ_a and Θ_b respectively. The top and bottom black faces adiabatic algorithm evaluates the temperature at a location on one of these adiabatic surfaces. In this configuration, the only heat transfer is radiation.

Table 1: Evaluation of the temperature Θ in configuration 1 at stationary state using $N = 100000$ samples. σ is the error bar, $N_{1\%}$ is the number of samples required to reach a 1% accuracy and $t_{1\%}$ the corresponding computation time. $\Theta_a = (1 - p)\Theta_{ref}$, $\Theta_b = (1 + p)\Theta_{ref}$ where $p \in [-1, 1]$, $\hat{\Theta} = \max(\Theta_a, \Theta_b)$, $\Theta_{min} = \min(\Theta_a, \Theta_b)$ and Θ^* is the analytic solution. The computation times displayed correspond to an Intel Core i5 - 2.5Ghz without parallelization. N_b is the average number of branches generated per path.

p	$\frac{x}{l}$	$\frac{l}{L}$	$\frac{\Theta^* - \Theta_{min}}{\hat{\Theta} - \Theta_{min}}$	$\frac{\Theta - \Theta_{min}}{\hat{\Theta} - \Theta_{min}}$	σ	$N_{1\%}$	$t_{1\%}(s)$	N_b
1.00	0.50	1.0	0.8409	0.8404	1.16E-03	1956	0.0936	84.6
0.75	0.50	1.0	0.8145	0.8132	1.35E-03	2503	0.1156	85.5
0.50	0.50	1.0	0.7652	0.7649	1.71E-03	5126	0.2408	65.3
0.25	0.50	1.0	0.6673	0.6663	2.51E-03	14048	0.1755	18.8
0.10	0.50	1.0	0.5735	0.5679	3.46E-03	38080	0.1726	6.4
0.05	0.50	1.0	0.5373	0.5353	3.91E-03	52251	0.1670	4.4
0.25	0.90	1.0	0.7851	0.7821	2.08E-03	7114	0.0386	7.2
0.25	0.70	1.0	0.7295	0.7301	2.29E-03	10397	0.0772	10.5
0.25	0.30	1.0	0.5988	0.5982	2.71E-03	21281	1.3475	103.6
0.25	0.10	1.0	0.5991	*	*	*	*	*
0.25	0.50	0.1	0.6673	0.6668	2.50E-03	12985	0.1388	18.8
0.25	0.50	0.5	0.6673	0.6697	2.49E-03	13962	0.1573	18.9
0.25	0.50	2.0	0.6673	0.6610	2.52E-03	13923	0.2001	18.7
0.25	0.50	10.0	0.6673	0.6690	2.50E-03	13877	0.6191	18.5
0.25	0.50	50.0	0.6673	0.6647	2.51E-03	14327	7.1525	18.6

3.2 Configuration 2

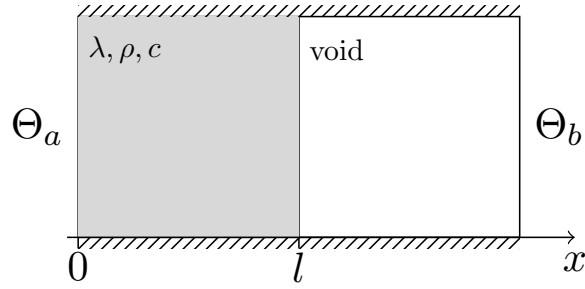


Figure 3. This configuration is composed of a solid domain of length l (gray rectangle) and an empty cavity (white rectangle) where each face is a black body. The temperature of the left face of the solid is fixed at Θ_a , and the high and low sides of the solid are adiabatic. λ is the conductivity of the solid, ρ is the density of the material and c the mass heat capacity. The temperature of the right face in the cavity is fixed at Θ_b . The left face of the cavity is a black body. The upper and lower faces of the cavity are adiabatic specular. The algorithm evaluates the temperature at a location within the solid.

Table 2: Evaluation of the temperature Θ in configuration 2 using $N = 100000$ samples. σ is the error bar, $N_{1\%}$ is the number of samples required to reach a 1% accuracy and $t_{1\%}$ the corresponding computation time. $\Theta_a = (1 - p)\Theta_{ref}$, $\Theta_b = (1 + p)\Theta_{ref}$ where $p \in [-1, 1]$, $\Theta = \max(\Theta_a, \Theta_b)$, $\Theta_{min} = \min(\Theta_a, \Theta_b)$ and Θ^* is the analytic solution. $\tau = \frac{2\lambda}{\rho c l^2}$ is the conduction characteristic time. N_b is the average number of branches generated per path. The computation times displayed correspond to an Intel Core i5 - 2.5Ghz without parallelization.

p	$\frac{x}{l}$	$\frac{t}{\tau}$	$\frac{pR}{pC}$	$\frac{\Theta^* - \Theta_{min}}{\Theta - \Theta_{min}}$	$\frac{\Theta - \Theta_{min}}{\Theta - \Theta_{min}}$	σ	$N_{1\%}$	$t_{1\%}(s)$	N_b
0.50	1.00	∞	0.001	0.0295	0.0295	2.23E-04	576820	1.87E+01	0.1456
0.50	1.00	∞	0.01	0.2782	0.2785	5.24E-04	35851	1.73E+00	1.8937
0.50	1.00	∞	0.1	0.8759	0.8761	3.35E-04	1483	2.05E-02	3.4833
0.50	1.00	∞	0.5	0.9750	0.9753	1.56E-04	203	9.83E-04	3.1042
0.50	1.00	∞	1.0	0.9875	0.9875	1.11E-04	51	2.00E-04	3.0528
0.50	1.00	∞	2.0	0.9937	0.9937	7.89E-05	51	1.17E-04	3.0244
0.50	1.00	∞	10.0	0.9987	0.9987	3.58E-05	51	6.20E-05	2.9986
0.50	1.00	∞	100.0	0.9998	0.9999	1.14E-05	51	5.50E-05	3.0023
0.50	0.95	∞	1.0	0.9381	0.9383	2.41E-04	51	1.71E-04	2.8898
0.50	0.90	∞	1.0	0.8887	0.8887	3.15E-04	1401	7.19E-03	2.7488
0.50	0.75	∞	1.0	0.7406	0.7406	4.38E-04	3706	2.78E-02	2.2906
0.50	0.50	∞	1.0	0.4937	0.4936	5.00E-04	10432	9.94E-02	1.5218
0.50	0.25	∞	1.0	0.2468	0.2473	4.31E-04	30769	2.05E-01	0.7614
0.50	0.10	∞	1.0	0.0987	0.0986	2.98E-04	91611	3.05E-01	0.3058
0.50	0.05	∞	1.0	0.0493	0.0495	2.17E-04	189298	3.56E-01	0.1537
0.90	1.00	∞	1.0	0.9874	0.9874	1.11E-04	101	2.43E-04	3.1345
0.70	1.00	∞	1.0	0.9874	0.9875	1.11E-04	227	7.75E-04	3.0946
0.30	1.00	∞	1.0	0.9875	0.9875	1.11E-04	51	1.15E-04	2.9901
0.10	1.00	∞	1.0	0.9875	0.9878	1.10E-04	51	1.58E-04	2.9145
-0.05	1.00	∞	1.0	0.0165	0.0177	1.73E-03	51	1.58E-04	7.3124
-0.1	1.00	∞	1.0	0.0221	*	*	*	*	*
0.50	0.50	0.05	0.1	*	0.0102	1.05E-04	*	*	0.0703
0.50	0.50	0.1	0.1	*	0.0594	2.41E-04	163268	6.49E-01	0.3595
0.50	0.50	0.5	0.1	*	0.3548	4.81E-04	18417	2.55E-01	1.5172
0.50	0.50	1	0.1	*	0.4261	4.97E-04	13454	2.01E-01	1.7073
0.50	0.50	∞	0.1	0.4380	0.4383	4.98E-04	12809	2.08E-01	1.7463

3.3 Configuration 3

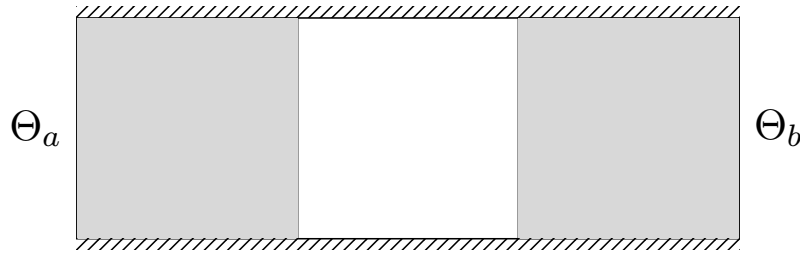


Figure 4. This configuration is composed of two solid domains (gray rectangle) of conductivity λ and an empty cavity (white rectangle). The temperature of the left face of the left solid is fixed at Θ_a , the temperature of the right face of the right solid is fixed at Θ_b , the top and bottom faces of the two solids are adiabatic. The left and right faces of the cavity are black bodies. The top and bottom faces of the cavity are specular adiabatic.

4. CONCLUSION

The simulation examples of the preceding section indicate that the *Branching Algorithm* described in Figure 1 is practical. The convergence speed of the *Branching Algorithm* is the same as that of the *Linearized Algorithm* and the temperature can be accurately evaluated (Tables 1 and 2). To our knowledge, this is the first Monte-Carlo-type algorithm able to solve a non-linear transient coupled heat-transfer problem Eq. (1), where radiative non-linearity is taken into account. We have seen some configurations for which this algorithm generates an infinite number of branches. But inside validity range the algorithmic structure is immediately usable together with computer-graphics tools handling complex geometry [17–19]. The next step is therefore to better characterise this validity range and working on the integral formulation (7) in order to reduce the number of branches, for example using a Picard strategy. This could lead to losing the full accuracy of the method, but, would enable this algorithm to be used in wider industrial contexts.

REFERENCES

- [1] R. Fournier, S. Blanco, V. Eymet, M. El-hafi, R. Fournier, S. Blanco, V. Eymet, M. El-hafi, and C. S. Ra, “Radiative , conductive and convective heat-transfers in a single Monte Carlo algorithm,” 2018.
- [2] R. Fournier, S. Blanco, V. Eymet, M. El Hafi, and C. Spiesser, “Radiative, conductive and convective heat-transfers in a single Monte Carlo algorithm,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 676, no. 1, p. 012007, 2015.
- [3] W. R. Martin, F. B. Brown, W. R. Martin, and F. B. Brown, “COMPARISON OF MONTE CARLO METHODS FOR NONLINEAR RADIATION TRANSPORT,” vol. 836.
- [4] A. B. Wollaber and R. Sciences, “Advanced Monte Carlo Methods for Thermal Radiation Transport by,” 2008.
- [5] R. S. e. M. P. M. John R. Howell, “Thermal Radiation, Heat Transfer,” 2011.
- [6] M. Galtier, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, A. Khuong, B. Piaud, and G. Terrée, “Integral Formulation of Null-Collision Monte Carlo Algorithms,” vol. 125, pp. 57–68.
- [7] H. R. Skullerud, “The Stochastic Computer Simulation of Ion Motion in a Gas Subjected to a Constant Electric Field,” vol. 1, no. 11, pp. 1567–1568.
- [8] S. Lin and J. Bardsley, “The Null-Event Method in Computer Simulation,” vol. 15, no. 3-4, pp. 161–163.
- [9] M. Galtier, S. Blanco, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, M. Roger, C. Spiesser, and G. Terrée, “Radiative Transfer and Spectroscopic Databases: A Line-Sampling Monte Carlo Approach,” vol. 172, pp. 83–97.
- [10] M. Galtier, M. Roger, F. André, and A. Delmas, “A Symbolic Approach for the Identification of Radiative Properties,” vol. 196, pp. 130–141.

- [11] P. Kutz, R. Habel, Y. K. Li, and J. Novák, “Spectral and Decomposition Tracking for Rendering Heterogeneous Volumes,” vol. 36, no. 4, pp. 1–16.
- [12] J. Novák, I. Georgiev, J. Hanika, and W. Jarosz, “Monte Carlo Methods for Volumetric Light Transport Simulation,” vol. 37, no. 2, pp. 551–576.
- [13] J. Dauchet, J.-J. Bézian, S. Blanco, C. Caliot, J. Charon, C. Coustet, M. El Hafi, V. Eymet, O. Farges, V. Forest, *et al.*, “Addressing nonlinearities in Monte Carlo,” *Scientific reports*, vol. 8, no. 1, p. 13302, 2018.
- [14] J. Dauchet, S. Blanco, J.-F. Cornet, M. El Hafi, V. Eymet, and R. Fournier, “The practice of recent radiative transfer Monte Carlo advances and its contribution to the field of microorganisms cultivation in photobioreactors,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 128, pp. 52–59, 2013.
- [15] J. Charon, S. Blanco, J.-F. Cornet, J. Dauchet, M. El Hafi, R. Fournier, M. K. Abboud, and S. Weitz, “Monte Carlo Implementation of Schiff’s Approximation for Estimating Radiative Properties of Homogeneous, Simple-Shaped and Optically Soft Particles: Application to Photosynthetic Micro-Organisms,” vol. 172, pp. 3–23.
- [16] G. Terrée, M. E. Hafi, S. Blanco, R. Fournier, J. Dauchet, and J. Gautrais, “Addressing the gas kinetics Boltzmann equation with branching paths statistics,” no. December, 2017.
- [17] J. Delatorre, G. Baud, J. Bézian, S. Blanco, C. Caliot, J. Cornet, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, O. Gourmel, D. Joseph, N. Meilhac, A. Pajot, M. Paulin, P. Perez, B. Piaud, M. Roger, J. Rolland, F. Veynandt, and S. Weitz, “Monte Carlo Advances and Concentrated Solar Applications,”
- [18] “EDStar platform demonstrator.” http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/prod/fr/.
- [19] “Star-4V/S : evaluates an invariant property of diffuse random walks.” https://gitlab.com/meso-star/star-4v_s.

7.3 Monte-Carlo Non-linéaire et le calcul des sensibilités

Dans cette section, nous nous sommes intéressés aux calculs des sensibilités par MC et au fait qu'il est théoriquement possible d'estimer la grandeur et les sensibilités simultanément, comme expliqué dans la section 2.1.6 page 29.

Avant d'avoir pu nous focaliser sur la question du calcul des sensibilités en thermique non-linéaire, nous avons été confrontés à une difficulté liée à l'emploi des algorithmes à collisions nulles lors du calcul des sensibilités (indépendamment de la non-linéarité). Cette difficulté n'avait jamais été rencontrée auparavant. Elle a lieu lorsque le majorant \hat{k} du coefficient d'extinction k est choisi de façon optimale (autrement dit lorsque le coefficient de collisions nulles $k_n = \hat{k} - k$ tend vers 0), ce que nous cherchons systématiquement à faire, dans le but de générer le moins de collisions nulles possible.

L'emploi des ACN conduit à une expression intégrale faisant intervenir la quantité $p_n = k_n/\hat{k}$. Après dérivation, et dans le but d'écrire la sensibilité sous une formulation intégrale équivalente à celle de la grandeur (pour envisager le calcul simultané), la dérivée de p_n fait émerger la quantité $1/k_n$ qui intervient comme facteur dans le poids de Monte-Carlo. Par conséquent, lorsque k_n tend vers 0, la quantité $1/k_n$ tend vers l'infini, d'où la difficulté.

Pour contourner cette difficulté, nous proposons une réponse dans l'article [69] ci dessous. La technique proposée, repose sur l'idée suivante : voir les algorithmes à collisions nulles, non pas comme une technique élégante de contournement des hétérogénéités, mais plutôt comme une méthode de rejet "habituelle" (voir [95]). Partant de ce concept, la technique des sensibilités est appliquée en amont de la technique des algorithmes à collisions nulles permettant d'éliminer toutes les difficultés rencontrées.

Convergence issues in derivatives of Monte Carlo null-collision integral formulations: a solution

J-M. Tregan^a, S. Blanco^a, J. Dauchet^c, M. El Hafi^b, R. Fournier^a, L. Ibarrart^b, P. Lapeyre^d, N. Villefranque^{e,f}

^aLAPLACE, UMR 5213 - Université Paul Sabatier, 118, Route de Narbonne - 31062 Toulouse Cedex, France

^bLaboratoire RAPSODEE - UMR 5302 - ENSTIMAC - Campus Jarlard - 81013 Albi CT Cedex 09, France

^cUniversité Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

^dPROMES - UPR CNRS 8521 - 7, rue du Four Solaire, 66120 Font Romeu Odeillo, France

^eCentre National de Recherches Météorologiques (CNRM), UMR 3589 CNRS, Météo France, Toulouse

^fLaboratoire Plasma et Conversion d'Énergie (LAPLACE), UMR 5213 CNRS, Université Toulouse III

Abstract

When a Monte Carlo algorithm is used to evaluate a physical observable A , it is possible to slightly modify the algorithm so that it evaluates simultaneously A and the derivatives $\partial_{\zeta}A$ of A with respect to each problem-parameter ζ . The principle is the following: Monte Carlo considers A as the expectation of a random variable, this expectation is an integral, this integral can be derivated as function of the problem-parameter to give a new integral, and this new integral can in turn be evaluated using Monte Carlo. The two Monte Carlo computations (of A and $\partial_{\zeta}A$) are simultaneous when they make use of the same random samples, i.e. when the two integrals have the exact same structure. It was proven theoretically that this was always possible, but nothing insures that the two estimators have the same convergence properties: even when a large enough sample-size is used so that A is evaluated very accurately, the evaluation of $\partial_{\zeta}A$ using the same sample can remain inaccurate. We discuss here such a pathological example: null-collision algorithms are very successful when dealing with radiative transfer in heterogeneous media, but they are sources of convergence difficulties as soon as sensitivity-evaluations are considered. We analyse theoretically these convergence difficulties and propose an alternative solution.

Keywords: Monte Carlo method, Direct derivatives, Null-collision algorithm, Sensitivity, Integral formulation

2010 MSC: 00-01, 99-00

1. Introduction

When numerically simulating linear-transport physics using Monte Carlo algorithms, one of the most recurrent difficulties is the handling of highly non-homogenous or fast-varying media. This difficulty was encountered since the beginning of neutron-transport and plasma-physics modelling. But a quite elegant trick was soon identified as a way to bypass this difficulty : virtual collisionners can be added where the true collisionners are scarce so that the total collisionner-density is homogeneous. Of course, in order to ensure that the physical problem is unchanged, when a particle interacts with a virtual collisionner, it simply continues its path as if no collision had occurred [1, 2, 3, 4]. This is the meaning of the denomination *null-collision algorithm* or *fictitious-collision algorithm*¹. The

*Corresponding author

Email address: tregan@laplace.univ-tlse.fr (J-M. Tregan)

¹Similar keywords are *pseudo-collision*, *null-events*, *fictitious-events*, *null-collisions*, *Woodcock tracking* and *maximum cross-section*

first practical benefit is that the next collision event can be sampled as if the medium was homogenous. Then the
 10 choice is made to select a true-collision or a virtual-collision as function of their local respective-amounts and this
 is how the spatial information is recovered. But several other benefits were recently foreseen in [1] and practically
 tested in [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16], mainly for radiative-transfer applications. The main idea is
 that null-collision algorithms transform the non-linearity of Beer-extinction into a linear-recursive problem that
 Monte Carlo handles without approximation[14]. This was for instance used in [5] to deal with absorption-spectra
 15 of molecular gases combining very numerous transitions: the summation over all transitions could be treated by
 the Monte Carlo algorithm itself, which was previously assumed impossible because this summation was inside the
 exponential of Beer-extinction. Similarly, the vanishing of the exponential allowed the extension of implicit Monte
 Carlo algorithms for inversion of absorption and scattering coefficients from intensity measurements [6]. Outside
 radiative transfer, a very similar idea was used to solve Electromagnetic Maxwell equations for energy propagation
 20 in particle-ensembles of statistically-distributed shapes despite of the nonlinearity associated to the square of the
 electric field[13]. Again similar is the algorithm proposed in [14] solving Boltzmann equation for micro-fluidics
 applications despite of the nonlinearity of the collision operator.

Back to radiative-transfer applications, the ideas suggested in [1] have motivated significant developments in the
 computer-graphics community for the cinema industry. Here the benefit of using null-collisions is that it extends to
 25 participating media (aerosols or clouds) the orthogonality between data-description and data-treatment that was
 at the heart of the most recent use of Monte Carlo for rendering complex scenes [7, 9, 8, 10]. The algorithm is
 indeed processed without any knowledge of the exact spatial-information, and it is only when a collision occurs that
 access to the field is required: the interaction between the radiative-transfer algorithm and the field-data is strictly
 restricted to this very moment. This allows the implementation of numerous acceleration techniques with little
 30 changes by comparison with those developed for handling complex surfaces. One of these techniques consists in the
 setting of an acceleration grid, adjusting the amount of virtual collisionners so that the total collisionner-density is
 both homogeneous in part and close enough to the real density-field. This avoids the sampling of too many useless
 virtual-collisions. This is one of the starting points of the present paper: null-collision algorithms allow the use of
 any amount of virtual-collisionners but numerical efficiency justifies that one tries to reduce them to the minimum.

35 However, we show here that reducing the amount of virtual-collisionners to a minimum leads to convergence
 difficulties when evaluating sensitivities. Sensitivity evaluation is a very general feature of Monte Carlo techniques:
 when a Monte Carlo algorithm is used to evaluate a physical observable A , it is always possible to modify the
 algorithm in such a way that it evaluates both A and the derivatives $\partial_{\zeta} A$ of A with respect to each problem-parameter
 ζ , and most commonly the corresponding implementation is quite straightforward [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]². But
 40 evaluating sensitivities using null-collision algorithms is pathological: the better we adjust the acceleration grid,
 the worse the statistical convergence rate. In Sec. 2 we will illustrate this pathological behaviour evaluating the
 transmissivity of a beam through a non-homogeneous column. Then we propose an alternative approach in Sec. 3
 where the design of the sensitivity-evaluation algorithm starts from the standard integral solution of the Boltzmann
 equation, i.e. without virtual-collisionners. The resulting sampling requirements are then addressed with the

²This is not at all straightforward for domain-deformation sensitivities[19, 20], but we here stick to pure parametric sensitivities

45 null-collision approach viewed as a simple rejection-sampling approach. This introduces the cost of sampling an additional random variable, but at this cost the convergence difficulties vanish. We illustrate the numerical behaviour of this modified algorithm in Sec. 4 using a benchmark inspired of [1].

2. Convergence difficulties when evaluating sensitivities

In this section we design a Monte-Carlo algorithm using the standard null-collision approach for the evaluation of the distribution function f , i.e. the solution of Boltzmann equation, and apply the technique of [19, 17] for simultaneous evaluation of a sensitivity $\partial_\varsigma f$ with respect to ς , where ς is a parameter appearing in the absorption and scattering coefficients. The Boltzmann equation that we use is linear with constant speed particles. It matches the monochromatic radiative-transfer equation exactly and all application examples will be restricted to radiative transfer. We choose to make use of the notation f instead of the more radiative-transfer oriented notation $I = h\nu c f$ (the specific intensity) in order to simplify the access for readers of the plasma and neutronics communities. The monochromatic radiative-transfer equation becomes

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f + c\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} f = -(k_a + k_s)cf + k_a c f^{eq} + \int_{4\pi} k_s c f' p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega', \quad \forall \vec{x} \in \Omega, \forall \vec{\omega} \in \mathbb{S}^2 \\ f(\vec{y}, \vec{\omega}_+) = f_{\partial\Omega}(\vec{y}, \vec{\omega}_+), \quad \forall \vec{y} \in \partial\Omega, \forall \vec{\omega}_+ \in \mathbb{S}_+^2 \\ f(\vec{x}, \vec{\omega}, 0, \varsigma) = f_0(\vec{x}, \vec{\omega}), \quad \forall \vec{x} \in \Omega, \forall \vec{\omega} \in \mathbb{S}^2 \end{array} \right. \quad (1)$$

where $f \equiv f(\vec{x}, \vec{\omega}, t, \varsigma)$ with \vec{x} the location, $\vec{\omega}$ the propagation direction and t the time. For incoming scattering in any direction $\vec{\omega}'$ of the unit sphere \mathbb{S}^2 , we write $f' \equiv f(\vec{x}, \vec{\omega}', t, \varsigma)$ and p_S is the single scattering phase function, i.e. $p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega})d\omega'$ is the probability density that the scattering direction is $\vec{\omega}$ for this incoming direction $\vec{\omega}'$. The constant particle-speed is c and the coefficients $k_a \equiv k_a(\vec{x}, t, \varsigma)$, $k_s \equiv k_s(\vec{x}, t, \varsigma)$ and $k_e = k_a + k_s$ are the absorption coefficient, the scattering coefficient and the extinction coefficient respectively. $f^{eq} \equiv f^{eq}(\vec{x}, t)$ is the equilibrium distribution (following the Planck function). Ω is the geometrical domain and $\partial\Omega$ its boundary at which the distribution function $f_{\partial\Omega}$ is known for all locations \vec{y} and all directions $\vec{\omega}_+$ of the incoming hemisphere \mathbb{S}_+^2 . f_0 is the initial condition.

Introducing null-collisions. In order to design a null collision algorithm (NCA)[1] we add a field of virtual collisionners such that the total extinction coefficient is practicable, in the sense that we can sample the corresponding beer extinction:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f + c\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} f = -\hat{k}cf + k_a c f^{eq} + \int_{4\pi} k_s c f' p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' + \int_{4\pi} k_n c f' \delta(\vec{\omega} - \vec{\omega}') d\omega', \quad \forall \vec{x} \in \Omega, \forall \vec{\omega} \in \mathbb{S}^2 \\ f(\vec{y}, \vec{\omega}_+) = f_{\partial\Omega}(\vec{y}, \vec{\omega}_+), \quad \forall \vec{y} \in \partial\Omega, \forall \vec{\omega}_+ \in \mathbb{S}_+^2 \\ f(\vec{x}, \vec{\omega}, 0, \varsigma) = f_0(\vec{x}, \vec{\omega}), \quad \forall \vec{x} \in \Omega, \forall \vec{\omega} \in \mathbb{S}^2 \end{array} \right. \quad (2)$$

60 where $k_n \equiv k_n(\vec{x}, t, \varsigma)$ is the null-collision coefficient, $\hat{k} = k_a + k_s + k_n$ is the total extinction-coefficient and δ is the Dirac distribution. Equation(2) is strictly equivalent to Eq.(1) because of the Dirac distribution that insures $\int_{4\pi} k_n c f' \delta(\vec{\omega} - \vec{\omega}') d\omega' = k_n c f$.

When numerically addressing the solution $f(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0)$ of this transport equation at $(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0)$ (also solution of Eq.(1)) using the Monte Carlo method, one of the most standard approach consists in a simple statistical reading that

allows to view $f(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0)$ as an average over radiative paths that are tracked backward from the observation location $(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0)$ to the sources[1]. In this reading, the pure transport term $\partial_t f + c\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} f$ corresponds to the spatial and temporal propagation of f in direction $\vec{\omega}$ at constant-speed c . The collisional term $-\hat{k}cf$ corresponds to either an absorption or a scattering event (including the null-collision events that are forward scattering events). When combining it with the transport term this leads to collision locations that are distributed exponentially along the line of sight (Beer law). Tracking the path backward, this means that the preceding collision at \vec{x}_1 is at a distance λ_0 that is a realisation of a random variable Λ_0 of probability density $p_{\Lambda_0}(\lambda_0) = \exp(-\hat{k}\lambda_0)$ (see Fig. D.1). Once \vec{x}_1 is sampled, the collision type is sampled in turn to decide whether an absorption, a true scattering or a null collision occurs. In the backward tracking picture, this corresponds respectively to the three remaining terms

- with $k_a c f^{eq}$ an absorption event is translated into thermal emission and the algorithm stops with the Monte Carlo weight $f^{eq}(\vec{x}_1)$ (the source at \vec{x}_1),
- with $\int_{4\pi} k_s c f' p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega'$ a scattering event is translated into the sampling of a “previous” direction $\vec{\omega}_1$ and the algorithm continues recursively as if evaluating $f(\vec{x}_1, \vec{\omega}_1)$,
- with $\int_{4\pi} k_n c f' \delta(\vec{\omega} - \vec{\omega}') d\omega'$ and its Dirac function, a null collision event is translated into a pure forward scattering event, i.e. the “previous” direction $\vec{\omega}_1$ is equal to $\vec{\omega}_0$.

Of course the statistical translation includes the boundary conditions: when backward reaching the boundary at a location \vec{x}_i and direction $\vec{\omega}_i$, the algorithm stops with the Monte Carlo weight $f(\vec{x}_i, \vec{\omega}_i)$ (the incoming source at the boundary). The corresponding Monte Carlo algorithm is detailed in Alg. 1 and illustrated in Fig. D.1.

Integral formulation. This null-collision algorithm belongs to the family of analog Monte Carlo algorithms, i.e. algorithms that can be designed without any formal development because they only numerically-implement the well established statistical pictures of radiation physics. However, in the present context it is very much useful to also choose a viewpoint under which the same algorithm appears as a statistical estimate of the integral solution of Eq.(2). For sake of clarity we only write this integral solution at the stationary limit:

$$f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = \exp\left(-\int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right) f_{\partial\Omega}(\vec{y}, \vec{\omega}) + \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} \exp\left(-\int_0^{\lambda} \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right) \left(\begin{array}{l} k_a(\vec{x}', \varsigma) f^{eq}(\vec{x}') \\ + k_s(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + k_n(\vec{x}', \varsigma) f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \end{array} \right) d\lambda \quad (3)$$

where $\vec{x} = \vec{x} - \tilde{\lambda}\vec{\omega}$, $\vec{x}' = \vec{x} - \lambda\vec{\omega}$, $\vec{y} = \vec{x} - \lambda_{\partial\Omega}\vec{\omega}$, with $\lambda_{\partial\Omega}$ the distance to the first boundary-intersection starting at \vec{x} in the direction $-\vec{\omega}$, i.e. $\lambda_{\partial\Omega} = \min\{\|\vec{x} - \mathbf{z}\|; \mathbf{z} \in \text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{\omega}) \cap \partial\Omega\}$ where $\text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{\omega}) = \{\vec{x} - \lambda'\vec{\omega}; \lambda' \in \mathbb{R}_+\}$. This standard Fredholm equation, typical of the formal solution of linear-transport physics, can be transformed using the following property

$$\exp\left(-\int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right) = \int_{\lambda_{\partial\Omega}}^{+\infty} \hat{k}(\vec{x}') \exp\left(-\int_0^{\lambda} \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right) d\lambda$$

to give

$$\begin{aligned}
f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = & \int_{\lambda_{\partial\Omega}}^{+\infty} \hat{k}(\vec{x}') \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right) f_{\partial\Omega}(\vec{y}, \vec{\omega}) d\lambda \\
& + \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} \hat{k}(\vec{x}') \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right) \left(\begin{aligned} & + \frac{k_a(\vec{x}', \varsigma)}{\hat{k}(\vec{x}')} f^{eq}(\vec{x}') \\ & + \frac{k_s(\vec{x}', \varsigma)}{\hat{k}(\vec{x}')} \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ & + \frac{k_n(\vec{x}', \varsigma)}{\hat{k}(\vec{x}')} f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \end{aligned} \right) d\lambda \quad (4)
\end{aligned}$$

Then

- $p_{\hat{\Lambda}}(\lambda) = \hat{k}(\vec{x}') \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right)$ can be viewed as the probability density function of the free path $\hat{\Lambda}$ (the distance until next collision),
- $P_A = \frac{k_a}{\hat{k}}$, $P_S = \frac{k_s}{\hat{k}}$ and $P_N = \frac{k_n}{\hat{k}}$ can be viewed as the probabilities that the collision is an absorption, a scattering event or a null-collision respectively,
- and the two integrals over $[0, \lambda_{\partial\Omega}[$ and $[\lambda_{\partial\Omega}, +\infty[$ can be gathered into a single integral over $[0, +\infty[$ using the Heaviside function \mathcal{H}

to give

$$\begin{aligned}
f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = & \int_0^{+\infty} p_{\hat{\Lambda}}(\lambda) d\lambda \left(\begin{aligned} & \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) w_{\partial\Omega} \\ & + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \left(\begin{aligned} & P_A(\vec{x}', \varsigma) w_A \\ & + P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ & + P_N(\vec{x}', \varsigma) f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \quad (5)
\end{aligned}$$

with $w_{\partial\Omega} = f_{\partial\Omega}(\vec{y}, \vec{\omega})$ and $w_A = f^{eq}(\vec{x}')$. This last equation is the integral formulation that we needed in order to construct Alg. 1 at the stationary limit: Alg. 1 is indeed nothing more than the algorithmic-reading of Eq. 5 (and reciprocally Eq. 5 is nothing more than the integral translation of Alg. 1, [18]):

- $\int_0^{+\infty} p_{\hat{\Lambda}}(\lambda) d\lambda$ stands for the sampling of the distance of the collision (according to the \hat{k} -field),
- $\mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega})$ stands for the case where the sampled collision is outside the boundary, then the algorithm stops at the boundary with the Monte Carlo weight $w_{\partial\Omega}$ (the value of f corresponding to the incoming radiation),
- $\mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda)$ stands for the case where the sampled collision is at a location \vec{x}' inside the volume, and then three collision types are possible:
 - $P_A(\vec{x}', \varsigma)$ stands for the case where the collision is an absorption, then the algorithm stops at the boundary with the Monte Carlo weight w_A (the value of f^{eq} at the collision location),
 - $P_S(\vec{x}', \varsigma)$ stands for the case where the collision is a scattering event, then $\int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega'$ stands for the sampling of a new direction $\vec{\omega}'$ according to the phase function and the algorithm continues recursively with the estimation of f at \vec{x}' in direction $\vec{\omega}'$,
 - $P_N(\vec{x}', \varsigma)$ stands for the case where the collision is null, then the algorithm continues recursively with the estimation of f at \vec{x}' in the unchanged direction $\vec{\omega}$

Straightforward application of sensitivity-evaluation techniques. Now that we have constructed the integral formulation of Alg. 1 we can apply the sensitivity-evaluation technique introduced in [17, 19, 20]. It consists in derivating Eq. 5 with respect to ς and multiplying and dividing by each of the probabilities and probability density functions that depend on ς . This leads to an integral formulation of the sensitivity that has the very same structure as that of Eq. 5:

$$\partial_\varsigma f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = \int_0^{+\infty} p_{\hat{\lambda}}(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) w_{\partial\Omega}^\varsigma \\ + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \left(\begin{array}{l} P_A(\vec{x}', \varsigma) w_A^\varsigma \\ + P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' \left(\begin{array}{l} \frac{\partial_\varsigma k_s(\vec{x}', \varsigma)}{k_s(\vec{x}', \varsigma)} f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \end{array} \right) \\ + P_N(\vec{x}', \varsigma) \left(\begin{array}{l} \frac{\partial_\varsigma k_n(\vec{x}', \varsigma)}{k_n(\vec{x}', \varsigma)} f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (6)$$

105 with $w_{\partial\Omega}^\varsigma = 0$ and $w_A^\varsigma = \frac{\partial_\varsigma k_a(\vec{x}', \varsigma)}{k_a(\vec{x}', \varsigma)} f^{eq}(\vec{x}')$. Because of their identical structure, we can gather Eq. 5 and 6 into one using the vectorial notation $\{w; w^\varsigma\}$:

$$\{f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma); \partial_\varsigma f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma)\} = \int_0^{+\infty} p_{\hat{\lambda}}(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) \{w_{\partial\Omega}; w_{\partial\Omega}^\varsigma\} \\ + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \left(\begin{array}{l} P_A(\vec{x}', \varsigma) \{w_A; w_A^\varsigma\} \\ + P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' \left\{ f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma); \left(\begin{array}{l} \frac{\partial_\varsigma k_s(\vec{x}', \varsigma)}{k_s(\vec{x}', \varsigma)} f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \end{array} \right) \right\} \\ + P_N(\vec{x}', \varsigma) \left\{ f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma); \left(\begin{array}{l} \frac{\partial_\varsigma k_n(\vec{x}', \varsigma)}{k_n(\vec{x}', \varsigma)} f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \end{array} \right) \right\} \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (7)$$

The algorithmic-reading of 7 leads to Alg. 2 that evaluates simultaneously f and $\partial_\varsigma f$. The recursive nature of this algorithm comes from the fact that the final brackets in the scattering and null-collision terms contain f and $\partial_\varsigma f$ at the same location in the same direction. The fact that their sensitivity part includes a summation is translated
110 into an algorithm incrementing the Monte Carlo weight as explained in Appendix Appendix B.

Simulation examples. At this stage, we designed a null-collision algorithm, constructed the corresponding integral formulation and applied the proposition of [17, 19, 20] in a straightforward manner so that the algorithm also evaluates sensitivities. We now test this simulation strategy by evaluating the transmissivity of a non-diffusive heterogeneous column and also evaluating the sensitivity of this transmissivity w.r.t. ς , a parameter influencing
115 the absorption coefficient. Hereafter this configuration is called *heterogeneous-slab* (see Fig. D.2): Ω is a column of length L with \vec{e}_x the normal incoming at location $y = 0$. The equilibrium distribution is null (cold medium, $f^{eq} \equiv 0$). The boundary conditions are $f^{\partial\Omega}(0, \vec{e}_x) = 0$ and $f_{\partial\Omega}(L, -\vec{e}_x) = f_{inc}$. The absorption and scattering coefficients are $k_a(x, \varsigma) = (\varsigma - \gamma) \frac{\text{atan}(-\alpha(x-\beta) + \frac{\pi}{2})}{\pi/2} + \gamma$ and $k_s \equiv 0$. Alg 2 is used to evaluate both $f(0, \vec{e}_x, \varsigma)$ and $\partial_\varsigma f(0, \vec{e}_x, \varsigma)$ that correspond to the transmissivity T and its derivative $\partial_\varsigma T$ respectively: $T = f(0, \vec{e}_x, \varsigma)/f_{inc}$ and

120 $\partial_\zeta T = \partial_\zeta f(0, \vec{e}_x, \zeta) / f_{inc}$. We chose this particular profile of k_a , because it is possible to calculate T and $\partial_\zeta T$ analytically (see the caption of Fig. D.2). Example Monte Carlo results, using $N = 10000$ samples, are compared to the analytical solution in Tables D.5a and D.5b. The statistical uncertainty is noted σ (the standard deviation of the Monte Carlo estimator). In Table D.5b we also provide the number of samples $N_{1\%}$ required to achieve a 1% accuracy. The simulations were made using five different \hat{k} -profiles (each overestimating k_a at all locations), with
 125 acceleration-grids, \hat{k} being uniform within each mesh (see Fig. D.2):

- for $\hat{k}_{20\%}$ no grid is used: the profile of \hat{k} is uniform, equal to 1.2 time the maximum k_a -value.
- for \hat{k}_1 no grid is used: the profile of \hat{k} is again uniform, exactly equal to the maximum k_a -value.
- for \hat{k}_{10} the grid is constructed in such a way that across each mesh the variations of k_a are 1/10 of the maximum k_a -value, and the profile of \hat{k} is uniform within each mesh, exactly equal to the maximum k_a -value
 130 inside the mesh.
- for \hat{k}_{100} and \hat{k}_{1000} the grid is constructed the same way with 1/100 and 1/1000 variation respectively.

The transmissivity results of Table D.5a confirm that the estimation of T is insensitive to the adjustment of the \hat{k} -field (only the computation time is affected). But the sensitivity results of Table D.5b clearly indicate the opposite: the statistical convergence is worse when \hat{k} is close to k and the number of samples required to reach a given
 135 accuracy level can be risen up to infinity when matching \hat{k} to k exactly. This is the pathological behavior that we announced in introduction: sensitivities cannot be evaluated accurately when using acceleration grids reducing the number of virtual collisions.

The variance of the sensitivity estimate. For a better understanding of this behavior, we studied a *homogeneous-slab* for which the variance of the Monte Carlo estimate can be calculated analytically. This case is identical to the previous one (transmissivity of a purely absorbing column) but now $k = k_a$ is uniform: $k_a(\zeta) \equiv \zeta$, $T = \exp(-\zeta L)$ and $\partial_\zeta T = -LT$. Of course, there is no need to make use of a null-collision algorithm as soon as k is uniform. We only do it for theoretical reasons (with $\hat{k} > k$ uniform). This allows us to fully identify the reasons why the variance of the sensitivity estimate rises when reducing $k_n = \hat{k} - k$. This may sound trivial as soon as when encountering a null-collision event, the Monte Carlo weight of the sensitivity algorithm includes a factor $\frac{\partial_\zeta k_n(\vec{x}', \zeta)}{k_n(\vec{x}', \zeta)} = 1/k_n$ (see Eq. 7), but reducing k_n also reduces the number of such null-collision occurrences. This may lead to a compensation, maintaining the variance at a finite value. The developments of appendix Appendix A.1 indicate the opposite: the statistical uncertainty is indeed

$$\sigma_{\partial_\zeta T} = \frac{\sqrt{L^2 e^{-k_a L} \left(\frac{k_n + 1/L}{k_n} \right) - L^2 e^{-2k_a L}}}{\sqrt{N}} \quad (8)$$

Figure D.3 illustrates the meaning of this dependance of $\sigma_{\partial_\zeta T}$ with the problem parameters. In this idealised case, looking at the behavior of such an algorithm applying sensitivity-evaluation techniques in a straightforward
 140 manner, the difficulty is well identified: when $\frac{k_n}{k}$ approaches zero, the number of samples required for a 1% accurate evaluation of the sensitivity tends to infinity (see Fig. D.3c). This figure also displays the behavior of an algorithm implementing the very same sensitivity-evaluation technique, but without the use of null-collisions

(which is possible here in this idealised uniform case). Without null-collisions, the relative value of the standard deviation of the sensitivity-estimate (Fig. D.3b) is identical to that of the main quantity (the transmissivity-estimate, Fig. D.3a). This is an ideal behaviour: the sensitivity is estimated with the same relative accuracy as that of the main quantity. Altogether in this simple example, we see that evaluating sensitivities can be perfectly costless *before* using null-collisions and may become pathological *when null-collisions are introduced*.

Note that in the general case, even without null-collisions, evaluating sensitivities can be truly difficult. Understanding the relative variance of sensitivity estimates and comparing them to the relative variance of the algorithm estimating the main quantity was indeed one of the main concerns of the initial work of De Lataillade[17]. Essentially, serious difficulties arise as soon as the scattering optical-thickness is high. The objective of the present paper is not at all to address this specific issue: at the end of the following section, when an alternative solution will be proposed for evaluating sensitivities in null collisions algorithms, the problems associated to highly scattering media will remain unsolved.

3. An alternative approach

The preceding section identifies convergence difficulties when evaluating sensitivities using null-collisions. These difficulties are not associated to the standard sensitivity-evaluation algorithm itself: considering slab transmission, we have seen that when we do not make use of null-collisions, the sensitivity-evaluation algorithm converges as well as the algorithm evaluating the main quantity. So the observed difficulties are only the consequences of introducing virtual-collisionners. At this stage, null-collision algorithms appear therefore as perfect tools for handling heterogeneous fields, but are incompatible with the simultaneous evaluation of sensitivities.

We have seen that this problem is related to the term $\frac{1}{k_n}$ appearing in the Monte Carlo weight of the sensitivity algorithm. At which stage did this term appear and can we bypass this step? Clearly, $\frac{1}{k_n}$ appeared when derivating with ς the null-collision probability $P_N(\varsigma) = 1 - P_A(\varsigma) - P_S(\varsigma)$, with $P_A(\varsigma) = k_a(\varsigma)/\hat{k}$ and $P_S = k_s(\varsigma)/\hat{k}$. A first way to suppress this $\frac{1}{k_n}$ term consists in making \hat{k} dependent on ς . This is always possible because \hat{k} is a free parameter and we can therefore adjust it to the variation of $k_a(\varsigma) + k_s(\varsigma)$ so that P_N does not depend on ς anymore. We first tested this solution and it proved itself already quite practical: the corresponding details are provided in Appendix Appendix D. But we finally retained another algorithm, starting from the integral solution of the original Boltzmann Eq. 1, i.e. prior to the introduction of virtual-collisionners. The idea consists in first designing an algorithm evaluating simultaneously f and $\partial_\varsigma f$ as if the heterogeneity of the field could be handled without difficulty and only introduce null-collisions in a second stage. For this, we can simply rewrite Eq. 5 with $k_n = 0$ (no virtual collisionners):

$$f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) w_{\partial\Omega} \\ + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \left(\begin{array}{l} P_A(\vec{x}', \varsigma) w_A \\ + P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (9)$$

The only differences with Eq. 5 are that

- $P_N = 0$,

- the random variable $\hat{\Lambda}$ of probability density $p_{\hat{\Lambda}}(\lambda) = \hat{k}(\vec{x}') \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}(\vec{x}) d\tilde{\lambda}\right)$ (the free path in the \hat{k} -field) is replaced with the random variable Λ of probability density $p_\Lambda(\lambda) = k_e(\vec{x}', \varsigma) \exp\left(-\int_0^\lambda k_e(\vec{x}, \varsigma) d\tilde{\lambda}\right)$ (the free path in the original k_e -field).

165

This equation can then be derivated with respect to ς and multiplied/divided by each of the probabilities and probability density functions that depend on ς (exactly the same way Eq. 7 was constructed from Eq. 5) to give

$$\partial_\varsigma f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) \left(-w_{\partial\Omega} \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} \partial_\varsigma k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma) dl + w_{\partial\Omega}^\varsigma \right) \\ P_A(\vec{x}', \varsigma) \left(-w_A \int_0^\lambda \partial_\varsigma k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma) dl + w_A^\varsigma \right) \\ + P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' \\ \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \left(\begin{array}{l} - \int_0^\lambda \partial_\varsigma k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma) dl f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \frac{\partial_\varsigma k_s(\vec{x}', \varsigma)}{k_s(\vec{x}', \varsigma)} f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (10)$$

A main point of the present paper is that this integral equation, although it was derived the same way as Eq. 7, cannot be interpreted in algorithmic terms: the integral pattern $\int \partial_\varsigma k_e dl$ is not yet transformed into a statistical expectation. An additional random generation will be required. At this stage let us introduce an arbitrary random variable L of probability density function p_L and write $\int \partial_\varsigma k_e dl = \int p_L(l) dl \frac{\partial_\varsigma k_e}{p_L(l)}$. Reporting this into Eq. 10 and using $\int p_L(l) dl = 1$ leads to

$$\partial_\varsigma f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} p_L(l|\lambda_{\partial\Omega}) dl \left(-w_{\partial\Omega} \frac{\partial_\varsigma k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda_{\partial\Omega})} + w_{\partial\Omega}^\varsigma \right) \\ P_A(\vec{x}', \varsigma) \left(-w_A \frac{\partial_\varsigma k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} + w_A^\varsigma \right) \\ + P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' \\ \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \int_0^\lambda p_L(l|\lambda) dl \left(\begin{array}{l} - \frac{\partial_\varsigma k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \frac{\partial_\varsigma k_s(\vec{x}', \varsigma)}{k_s(\vec{x}', \varsigma)} f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (11)$$

At this stage, null-collisions have not been introduced. Therefore, the algorithmic reading of Eq. 11 would not be practical as soon as the k_e -field is heterogeneous: the difficulty would come from the sampling of Λ . The objective of introducing null collisions will therefore be to replace Λ with another path-length $\hat{\Lambda}$, shorter in average but easy to sample, and compensate the too many collisions by the fact that some of them are null. However, this not as trivial as in the algorithm for the main quantity because of the new random variable L that we needed to introduce when transforming Eq. 10 into Eq. 11 (transforming it into an expectation). Indeed $\partial_\varsigma k_e$ needs to be integrated

along the whole path, now including null collisions. In statistical terms, this means that the recursivity of the path-sampling algorithm is only insured if the Monte Carlo weight associated to null collisions includes the term $-\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)/p_L(l|\lambda)f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma)$, exactly like for true scattering events:

$$\partial_\zeta f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} p_L(l|\lambda_{\partial\Omega}) dl \left(-w_{\partial\Omega} \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda_{\partial\Omega})} + w_{\partial\Omega}^\varsigma \right) \\ + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \int_0^\lambda p_L(l|\lambda) dl \left(\begin{array}{l} P_A(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma) \left(-w_A \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} + w_A^\varsigma \right) \\ + P_S(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\boldsymbol{\omega}}' | -\vec{\boldsymbol{\omega}}) d\omega' \\ \left(\begin{array}{l} - \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma) \\ + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma)}{k_s(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma)} f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma) \\ + \partial_\zeta f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma) \end{array} \right) \\ + P_N(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma) \left(\begin{array}{l} - \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma) \\ + \partial_\zeta f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (12)$$

Equations 5 and 12 have now a similar structure: all the samples used to evaluate f can also be used for the evaluation of $\partial_\zeta f$. But in order to complete the evaluation of sensitivity, we must add one sample (of L) per collision. Thanks to this similar structure, we can gather them into a single vectorial writing (exactly the same way Eq. 7 was constructed from Eq. 5 and 6):

$$\{f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma); \partial_\zeta f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma)\} = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} p_L(l|\lambda_{\partial\Omega}) dl \left\{ w_{\partial\Omega}; -w_{\partial\Omega} \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda_{\partial\Omega})} + w_{\partial\Omega}^\varsigma \right\} \\ + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \int_0^\lambda p_L(l|\lambda) dl \left(\begin{array}{l} P_A(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma) \left\{ w_A; -w_A \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} + w_A^\varsigma \right\} \\ + P_S(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\boldsymbol{\omega}}' | -\vec{\boldsymbol{\omega}}) d\omega' \\ \left\{ f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma); \left(\begin{array}{l} - \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma) \\ + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma)}{k_s(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma)} f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma) \\ + \partial_\zeta f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}', \varsigma) \end{array} \right) \right\} \\ + P_N(\vec{\mathbf{x}}', \varsigma) \left\{ f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma); \left(\begin{array}{l} - \frac{\partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)}{p_L(l|\lambda)} f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma) \\ + \partial_\zeta f(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\boldsymbol{\omega}}, \varsigma) \end{array} \right) \right\} \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (13)$$

The algorithmic-reading of 13 leads to Alg. 3 that is an alternative to Alg. 2 for evaluating simultaneously f and $\partial_\zeta f$. As explained in the algorithmic reading of Eq.7, the recursive nature of this algorithm comes from the fact that the final brackets in the scattering and null-collision terms contain f and $\partial_\zeta f$ at the same location in the same direction. The fact that their sensitivity part includes a summation is translated into an algorithm incrementing the Monte Carlo weight as explained in Appendix B. It is interesting to note that the integral $\int p_L(l) dl \partial_\zeta k_e(\mathbf{x}_l, \varsigma)/p_L(l)$ can be more or less difficult to evaluate depending on the profile of $\partial_\zeta k_e$. But this can be easily handled using importance sampling based on the \hat{k} -adjustment grid, as explained in Appendix C.

4. Simulations using the alternative approach

175 4.1. Transmissivity of a purely absorbing column

Applying the alternative approach of Sec. 3 to the evaluation of column-transmissivities leads to the content of Fig. D.3d and Table D.5c. For the *homogeneous-slab* configuration, Fig. D.3 shows that not only the pathological behavior of Sec. 2 is removed, but the sensitivity is estimated with a statistical uncertainty that is perfect for a simultaneous evaluation: its dependence on the parameters of the problem is identical to that of the main quantity. As above, in this very simple case, this uncertainty can be expressed analytically (see Appendix A.2) and indeed

$$\frac{\sigma_{\partial_\zeta T}}{\partial_\zeta T} = \frac{\sigma_T}{T} = \frac{\sqrt{1 - e^{-k_a L}}}{\sqrt{N}}$$

For the *heterogeneous-slab* configuration, the uncertainty cannot be predicted theoretically, but the conclusions of Fig. D.5 are identical to those of Fig. D.3: in terms of relative accuracy, the convergence rate is equal to that of the algorithm evaluating the main quantity. It is therefore strictly independent of the adjustment of \hat{k} to k . The use of an acceleration grid does only what we expect: it reduces the number of null-collisions but does not impact
180 the variance anymore.

4.2. Full radiative transfer in a 3D configuration

In [1], a cubic benchmark configuration was used to test null-collision algorithms when dealing with three-dimension highly-heterogeneous fields for all ranges of optical thickness and single-scattering albedo. We here make use of the same configuration, named *heterogeneous-cube* hereafter, in order to test our alternative approach with
185 3D radiation (see Fig. D.4):

- radiation is monochromatic;
- the cube is of side $2L$, with $0K$ black faces;
- the inside-temperature field is such that f^{eq} varies from $f^{eq} = f_{max}^{eq}$ (at the center of the face at $x = -L$) to $f^{eq} = 0$ (at $x = L$ and $(y = \pm L, z = \pm L)$) and mimics the shape of flame: $f^{eq}(x, y, z) = \eta(x, y, z)f_{max}^{eq}$ (see
190 the η profile in Fig. D.4);
- the fields of absorption and scattering coefficients follows the same spatial dependence: $k_a(x, y, z) = \eta(x, y, z)k_{a,max}$ and $k_s(x, y, z) = \eta(x, y, z)k_{s,max}$;
- The single-scattering phase function is that of Henyey-Greenstein with a uniform value of the asymmetry parameter g ;
- \hat{k} is adjusted to k using a regular cubic-grid (\hat{k} uniform within each mesh): the only parameter for \hat{k} is
195 therefore the number of mesh per direction.

The evaluated quantity $A(x, y, z)$ is the stationary net-power density and the free physical parameters are $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ and g . In Table D.6 we reproduce the computations of Table 1 in [1], i.e. testing wide ranges of optical thicknesses but fixing $g = 0$ (isotropic scattering). In the same table we also provide two sensitivities, $\partial_{k_{a,max}}$ and

200 $\partial_{k_s, max}$, that we evaluated simultaneously with A . As in [1], although they are not displayed, we checked that simulation results with non-isotropic scattering lead to the exact same conclusions.

These conclusions are very similar to those reached on the slab-transmissivity example: Table D.7 highlights the same features as Fig. D.5, the standard deviation of Alg. 3 being independent of \hat{k} , whereas it increases when \hat{k} gets close to k_e for Alg. 2.

205 5. Conclusion

The simulation examples of the preceding section indicate that the solution proposed in Sec. 3 is practical. Sensitivities can be accurately evaluated even when using null-collision algorithms. We still face convergence difficulties for highly-scattering media, but this is an open question identified in all linear-transport physics, independently of the use of null-collisions.

210 The way we bypassed the convergence difficulties specific to null-collisions is in rupture with the principle of evaluating sensitivities $\partial_\zeta A$ simultaneously with the main quantity A : in all previous works, the two evaluations were truly simultaneous in the sense that the very same samples were used in the A and $\partial_\zeta A$ Monte Carlo algorithms. Here, all the samples used to evaluate A are also used for the evaluation of $\partial_\zeta A$, but in order to complete the evaluation of $\partial_\zeta A$, some additional random variables must be sampled. The sensitivity evaluation has therefore a
 215 specific computation-cost. In all our test-cases, this cost was very small compared to the total computation cost, and considering the wide range of tested optical depths we may state that this additional cost has no practical significance for radiative transfer applications. Other linear-transport physics would have to be investigated specifically.

In the present text, we only gave very little indications about absolute computer-requirements. We provided some computation-time examples in Fig. D.6, without the use of any acceleration grid. Most of our analysis was
 220 made with another measure: the average number of random generation per path, which should be proportional to the computation time, but only once all optimisations will be implemented. As illustrated in [7, 9, 8, 10], such data-access considerations in relation with null-collision algorithms (i.e the time associated to a close adjustment of \hat{k} to k) is an ongoing computer-science research. The question of implementing the corresponding tools (developped by the computer-graphics community) together with the present sensitivity evaluation algorithm will be discussed
 225 in a separate paper.

Appendix A. Analytical variances for *homogeneous-slab*

Ω is a slab of length L with \vec{e}_x the incoming normal at location $\vec{y} = \mathbf{0}$ and $f_{\partial\Omega}(L, -\vec{e}_x, \cdot) = f_{inc}$ as boundary condition (see figure D.2). The equilibrium distribution f^{eq} is null (no emission) and the absorption and scattering coefficients are $k_a \equiv \varsigma$ and $k_s \equiv 0$. The transmissivity is $T = f(\mathbf{0}, \vec{e}_x, \cdot, \varsigma) / f_{inc}$.

230 *Appendix A.1. For the standard approaches*

Using Eq.(7),

$$\partial_\zeta T(L, \varsigma) = \int_0^\infty \hat{k} e^{-\hat{k}\lambda} d\lambda \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - L) 0 \\ + \mathcal{H}(L - \lambda) \left\{ \begin{array}{l} P_A(\varsigma) 0 \\ + P_N(\varsigma) \left(\frac{-1}{k_n(\varsigma)} T(L - \lambda, \varsigma) + \partial_\zeta T(L - \lambda, \varsigma) \right) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (\text{A.1})$$

To get the analytical variance for the standard approach (Alg. 2) in *homogeneous-slab*, we started by designing a countable categorisation of paths: \mathcal{C}_n ($n \in \mathbb{N}^*$) is the set of paths that crossed the column and met n null-collisions and \mathcal{C} all other paths (path without null-collisions). The probability p_n that a path belongs to the \mathcal{C}_n category is

$$p_n = \frac{\hat{k}^n}{n!} L^n e^{-\hat{k}L} \left(1 - \frac{k_a(\varsigma)}{\hat{k}}\right)$$

The Monte Carlo weight w_n obtained at the end of a path belonging to the \mathcal{C}_n is

$$w_n = \frac{-n}{k_n}$$

The weight of a path belonging to \mathcal{C} is zero. Therefore, the variance of the Alg. 2 is

$$\begin{aligned} \text{Var}_{\text{Alg.2}}(\partial_\varsigma T(L, \varsigma)) &= \sum_{n=1}^{\infty} p_n w_n^2 - \left(\sum_{n=1}^{\infty} p_n w_n\right)^2 \\ &= L^2 e^{-k_a L} \left(\frac{k_n + 1/L}{k_n}\right) - L^2 e^{-2k_a L} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Appendix A.2. For the alternative approach

Using Eq.(13),

$$\partial_\varsigma T(L, \varsigma) = \int_0^\infty \hat{k} e^{-\hat{k}\lambda} d\lambda \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - L) (-L) \\ + \mathcal{H}(L - \lambda) \left\{ \begin{array}{l} P_A(\varsigma) 0 \\ + P_N(\varsigma) \partial_\varsigma T(L - \lambda, \varsigma) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (\text{A.3})$$

The variance of a Bernoulli law of p parameter is $p(1-p)$, and therefore the variance of Alg. 3 is

$$\text{Var}_{\text{Alg.3}}(\partial_\varsigma T(L, \varsigma)) = L^2 e^{-k_a L} (1 - e^{-k_a L}) \quad (\text{A.4})$$

Similarly for Alg. 1,

$$\text{Var}_{\text{Alg.1}}(\partial_\varsigma T(L, \varsigma)) = e^{-k_a L} (1 - e^{-k_a L}) \quad (\text{A.5})$$

Appendix B. Incrementation of the Monte Carlo weights

The standard approach of Alg. 2 is designed from the algorithmic-reading of Eq. 7 and the recursive nature of this algorithm comes from the fact that the final brackets in the scattering and null-collision terms contain f and $\partial_\varsigma f$ at the same location in the same direction. As the integral formulation of f and $\partial_\varsigma f$ have identical structures, we can just use one unique sampled-path to evaluate simultaneously f and $\partial_\varsigma f$. For a better understanding of the meaning of this unique sampled-path, we express here the Monte Carlo weight for one path example: the path displayed in Fig. D.1, i.e. one null-collision at location \vec{x}_1 , two scatterings at location \vec{x}_2 and \vec{x}_3 , and one boundary-collision at location \vec{y}_4 . Thanks to the algorithmic-reading of Eq. 7, after one null-collision at location \vec{x}_1 . The notations are simplified by writing "f" instead of w_{f^n} . We have

$$\partial_\varsigma f(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0, \varsigma) = \partial_\varsigma f(\vec{x}_1, \vec{\omega}_0, \varsigma) + \frac{\partial_\varsigma k_n(\vec{x}_1, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_1, \varsigma)} f(\vec{x}_1, \vec{\omega}_0, \varsigma) \quad (\text{B.1})$$

At this stage, $\partial_\zeta f$ and f need to be evaluated at the same location (\vec{x}_1) in the same direction ($\vec{\omega}_0$). According to Eq. 7, it's possible to use the same path to evaluate $\partial_\zeta f$ and f . Therefore, after one scattering-collision at location \vec{x}_2 in direction $\vec{\omega}_2$, we have $\partial_\zeta f(\vec{x}_1, \vec{\omega}_0, \varsigma) = \partial_\zeta f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma) + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_2, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_2, \varsigma)} f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma)$ and $f(\vec{x}_1, \vec{\omega}_0, \varsigma) = f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma)$,

$$\begin{aligned} \partial_\zeta f(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0, \varsigma) &= \partial_\zeta f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma) + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_2, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_2, \varsigma)} f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma) + \frac{\partial_\zeta k_n(\vec{x}_1, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_1, \varsigma)} f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma) \\ &= \partial_\zeta f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma) + \left(\frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_2, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_2, \varsigma)} + \frac{\partial_\zeta k_n(\vec{x}_1, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_1, \varsigma)} \right) f(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2, \varsigma) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Similarly, after one scattering at location \vec{x}_3 in direction $\vec{\omega}_3$,

$$\begin{aligned} \partial_\zeta f(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0, \varsigma) &= \partial_\zeta f(\vec{x}_3, \vec{\omega}_3, \varsigma) + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_3, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_3, \varsigma)} f(\vec{x}_3, \vec{\omega}_3, \varsigma) + \left(\frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_2, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_2, \varsigma)} + \frac{\partial_\zeta k_n(\vec{x}_1, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_1, \varsigma)} \right) f(\vec{x}_3, \vec{\omega}_3, \varsigma) \\ &= \partial_\zeta f(\vec{x}_3, \vec{\omega}_3, \varsigma) + \left(\frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_3, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_3, \varsigma)} + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_2, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_2, \varsigma)} + \frac{\partial_\zeta k_n(\vec{x}_1, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_1, \varsigma)} \right) f(\vec{x}_3, \vec{\omega}_3, \varsigma) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

and after the boundary-collision at location \vec{y}_4 in direction $\vec{\omega}_3$,

$$\partial_\zeta f(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0, \varsigma) = w_{\partial\Omega}^\varsigma + \left(\frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_3, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_3, \varsigma)} + \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_2, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_2, \varsigma)} + \frac{\partial_\zeta k_n(\vec{x}_1, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_1, \varsigma)} \right) w_{\partial\Omega} \quad (\text{B.4})$$

where $w_{\partial\Omega}^\varsigma = 0$ and $w_{\partial\Omega} = f_{\partial\Omega}(\vec{y}_4, \vec{\omega}_3, \varsigma)$. The summation of f and $\partial_\zeta f$ is therefore translated into an algorithm incrementing the Monte Carlo weight. This is how the Monte Carlo weight is incremented in the fully recursive algorithm of Alg. 3.

245 Appendix C. The additional sampling

To evaluate $\partial_\zeta T$ with the alternative approach of Alg. 3, we must evaluate $\int_0^\lambda \partial_\zeta k_e(\vec{x}_l, \varsigma) dl$. We make use of one additional sampling:

$$\int_0^\lambda \partial_\zeta k_e(\vec{x}_l, \varsigma) dl = \int_0^\lambda p_L(l) dl \partial_\zeta k_e(\vec{x}_l, \varsigma) / p_L(l) \quad (\text{C.1})$$

However, depending on the the profile of $\partial_\zeta k_e$, this integral can be source of variance if the spatial variations of $p_L(l)$ do not sufficiently match those $\partial_\zeta k_e(\vec{x}_l)$. We did not yet adress this importance-sampling issue and bypassed it using stratified sampling: we increased the number of "collisions" by including the grid-intersections to write

$$\begin{aligned} \int_0^\lambda \partial_\zeta k_e(\vec{x}_l, \varsigma) dl &= \int_0^{\beta_1} p_L(l_1) dl_1 \partial_\zeta k_e(\vec{\zeta}_1, \varsigma) / p_L(l_1) \\ &+ \int_0^{\beta_2} p_L(l_2) dl_2 \partial_\zeta k_e(\vec{\zeta}_2, \varsigma) / p_L(l_2) \\ &+ \dots \\ &+ \int_0^{\beta_n} p_L(l_n) dl_n \partial_\zeta k_e(\vec{\zeta}_n, \varsigma) / p_L(l_n) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

where n is the number of grid-intersections along the path $[\vec{x}_0, \vec{x}_\lambda]$. For all $i \in [1, n]$, \vec{z}_i is the location of the i th "collision", β_i is the length between two successive "collisions" and $\vec{\zeta}_i = \vec{z}_i - l_i \vec{\omega}$ (see Fig. D.8).

This stratified sampling is only meaningful if we assume that the grid is sufficiently refined to capture the spatial variation of $\partial_\zeta k_e(\vec{x}_l)$. But initially, the grid was only designed to reduce the amount of null-collisions. Therefore, another grid-refinement criterium should be introduced if this strategy is retained. But again, stratified sampling is not the only possible solution and the grid may be used differently: make pre-computations in each mesh and sample L only once along the whole path using importance sampling, which would suppress the increase of computation costs when refining the grid in Fig. D.5 (R increasing in Fig. D.5c).

Appendix D. Another possible approach: \hat{k} varying with k_e

In Eq. (5), we chose to use a constant upper bound of k_e noted \hat{k} . Nevertheless, nothing prevents us from varying \hat{k} according to the parameter ς , while preserving the fact that $\hat{k}(\cdot, \varsigma)$ is independent of space in order to still enable an easy sampling of $\hat{\Lambda}$. Thus, we have complete freedom in the choice of these variations, and we will choose them to reduce the variance as much as possible.

In addition, we have shown that the explosion is due to the fact that Monte Carlo's weight includes a factor $1/k_n$. This factor appeared when applying the sensitivity evaluation technique to Eq. (5), especially because of the term $\partial_\varsigma \left(\frac{k_n}{\hat{k}} \right)$.

Therefore, and now that \hat{k} depends on ς , we may impose $\partial_\varsigma \left(\frac{k_n}{\hat{k}} \right) = 0$, which implies the following relation:

$$\partial_\varsigma \hat{k} = \frac{\partial_\varsigma k_e \hat{k}}{k_e}$$

Thus, by derivating Eq. (5), we obtain:

$$\begin{aligned} \partial_\varsigma f(\vec{x}, \vec{\omega}, \varsigma) = & \int_0^{+\infty} p_{\hat{\Lambda}}(\lambda) d\lambda \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(\lambda - \lambda_{\partial\Omega}) \left[-w_{\partial\Omega} \int_0^{\lambda_{\partial\Omega}} \partial_\varsigma \hat{k}(\vec{x}_l, \varsigma) dl + w_{\partial\Omega}^\varsigma \right] \\ P_A(\vec{x}', \varsigma) \left[\begin{array}{l} \psi(\vec{x}, \lambda, \varsigma) w_A \\ + \left(\frac{\partial_\varsigma k_a}{k_a} - \frac{\partial_\varsigma \hat{k}}{\hat{k}} \right) \Big|_{\vec{x}', \varsigma} w_A \\ + w_A^\varsigma \end{array} \right] \\ + \mathcal{H}(\lambda_{\partial\Omega} - \lambda) \left[\begin{array}{l} P_S(\vec{x}', \varsigma) \int_{4\pi} p_S(-\vec{\omega}' | -\vec{\omega}) d\omega' \left[\begin{array}{l} \psi(\vec{x}, \lambda, \varsigma) f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \left(\frac{\partial_\varsigma k_s}{k_s} - \frac{\partial_\varsigma \hat{k}}{\hat{k}} \right) \Big|_{\vec{x}', \varsigma} f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}', \varsigma) \end{array} \right] \\ + P_N(\vec{x}', \varsigma) \left[\begin{array}{l} \psi(\vec{x}, \lambda, \varsigma) f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \\ + \partial_\varsigma f(\vec{x}', \vec{\omega}, \varsigma) \end{array} \right] \end{array} \right] \end{array} \right) \quad (D.1) \end{aligned}$$

255 with $\psi(\vec{x}, \lambda, \varsigma) = \left(\frac{\partial_\varsigma \hat{k}(\vec{x}', \varsigma)}{\hat{k}(\vec{x}', \varsigma)} - \int_0^\lambda \partial_\varsigma \hat{k}(\vec{x}_l, \varsigma) dl \right)$

We have implemented the algorithm resulting from this integral formulation and compared it with the approach proposed in the core of the present paper. Whatever the case, it was always less efficient.

```

 $\bar{f}_N = 0;$ 
foreach  $i$  in  $1 : N$  do
   $j = 0;$ 
   $\bar{\mathbf{x}}_0 = \bar{\mathbf{x}};$ 
   $\bar{\boldsymbol{\omega}}_0 = \bar{\boldsymbol{\omega}};$ 
   $t_0 = t;$ 
   $Loop = .true.;$ 
  while  $Loop$  do
    Beer sampling of  $\lambda_j;$ 
     $t_{j+1} = t_j - \frac{\lambda_j}{c};$ 
     $\mathbf{x}_{j+1}^{\vec{}} = \bar{\mathbf{x}}_j - \lambda_j \bar{\boldsymbol{\omega}}_j;$ 
    if  $t_{j+1} < 0$  then
      if  $\lambda_{\partial\Omega}^j < \lambda_j$  then
         $f_N = \bar{f}_N + f_{\partial\Omega}(\mathbf{y}_{j+1}^{\vec{}}, \bar{\boldsymbol{\omega}}_j);$ 
      else
         $f_N = \bar{f}_N + f_0(\bar{\mathbf{x}}_j - ct_j \bar{\boldsymbol{\omega}}_j, \bar{\boldsymbol{\omega}}_j);$ 
      end
       $Loop = .false.;$ 
    else
      if  $\lambda_{\partial\Omega}^j < \lambda_j$  then
         $f_N = \bar{f}_N + f_{\partial\Omega}(\mathbf{y}_{j+1}^{\vec{}}, \bar{\boldsymbol{\omega}}_j);$ 
         $Loop = .false.;$ 
      else
        Uniform sampling of  $r;$ 
        if  $0 < r < P_A(\mathbf{x}_{j+1}^{\vec{}}, t_{j+1}, \pi)$  then
           $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}^{\vec{}}, t_{j+1});$ 
           $Loop = .false.;$ 
        else if  $P_A(\mathbf{x}_{j+1}^{\vec{}}) < r < P_A(\mathbf{x}_{j+1}^{\vec{}}, t_{j+1}, \pi) + P_S(\mathbf{x}_{j+1}^{\vec{}}, t_{j+1}, \pi)$  then
          Sampling of  $\boldsymbol{\omega}_{j+1}^{\vec{}};$ 
        end
      end
    end
     $j = j + 1;$ 
  end
 $\bar{f}_N = \frac{\bar{f}_N}{N};$ 

```

Algorithm 1: The initial backward tracking null-collision algorithm. The objective of simultaneously evaluating sensitivities will be discussed on the basis of this initial algorithm, with the idea that only small algorithmic modifications should be required to reach this goal. N is the number of samples used to produce one Monte Carlo estimate of $f(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\boldsymbol{\omega}}, t, \varsigma)$ along the algorithmic reading of Eq.(5). This estimate is noted \bar{f}_N . k_a , k_s , k_n and $\hat{k} = k_a + k_s + k_n$ are respectively the absorption coefficient, the scattering coefficient, the null-collision coefficient and the total extinction coefficient. At a given collision, $P_A(\bar{\mathbf{x}}, t, \varsigma) = \frac{k_a(\bar{\mathbf{x}}, t, \varsigma)}{\hat{k}}$, $P_S(\bar{\mathbf{x}}, t, \varsigma) = \frac{k_s(\bar{\mathbf{x}}, t, \varsigma)}{\hat{k}}$ and $P_N(\bar{\mathbf{x}}, t, \varsigma) = \frac{k_n(\bar{\mathbf{x}}, t, \varsigma)}{\hat{k}}$ are respectively the absorption probability, the scattering probability and the null-collision probability. $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}$ is the initial position, $\boldsymbol{\omega}_0 = \boldsymbol{\omega}$ is the initial direction, and $t_0 = t$ is the observation time. Ω is the geometrical domain, $\partial\Omega$ its boundary at which the distribution function $f_{\partial\Omega}$ is known for all locations $\bar{\mathbf{y}}$ and all directions $\bar{\boldsymbol{\omega}}_+$ of the incoming hemisphere \mathbb{S}_+^2 . f^{eq} is the equilibrium distribution (following the Planck function) and f_0 is the initial condition. For all $j \in \mathbb{N}$, $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}_j$, $t_{j+1} = t_j - \frac{\lambda_j}{c}$, $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \lambda_{\partial\Omega}^j \boldsymbol{\omega}_j$ s.t. $\lambda_{\partial\Omega}^j = \min\{\|\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{y}}\|; \bar{\mathbf{y}} \in \text{Vect}^-(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \cap \partial\Omega\}$ where $\text{Vect}^-(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\boldsymbol{\omega}}) = \{\bar{\mathbf{x}} - \lambda \bar{\boldsymbol{\omega}}; \lambda \in \mathbb{R}_+\}$.


```

{ $\bar{f}_N = 0$ ;  $\partial_\varsigma \bar{f}_N = 0$ };
foreach  $i$  in  $1 : N$  do
   $j = 0$ ;
   $\vec{x}_0 = \vec{x}$ ;
   $\vec{\omega}_0 = \vec{\omega}$ ;
   $t_0 = t$ ;
   $w = 0$ ;
   $Loop = .true.$ ;
  while  $Loop$  do
    Beer sampling of  $\lambda_j$ ;
     $t_{j+1} = t_j - \frac{\lambda_j}{c}$ ;
     $\vec{x}_{j+1} = \vec{x}_j - \lambda_j \vec{\omega}_j$ ;
    if  $t_{j+1} < 0$  then
      if  $\lambda_{\partial\Omega}^j < \lambda_j$  then
        { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$ ;  $\partial_\varsigma \bar{f}_N = \partial_\varsigma \bar{f}_N + w f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$ };
      else
        { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f_0(\vec{x}_j - ct_j \vec{\omega}_j, \vec{\omega}_j)$ ;  $\partial_\varsigma \bar{f}_N = \partial_\varsigma \bar{f}_N + w f_0(\vec{x}_j - ct_j \vec{\omega}_j, \vec{\omega}_j)$ };
      end
       $Loop = .false.$ ;
    else
      if  $\lambda_{\partial\Omega}^j < \lambda_j$  then
        { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$ ;  $\partial_\varsigma \bar{f}_N = \partial_\varsigma \bar{f}_N + w f_0(\vec{x}_j - ct_j \vec{\omega}_j, \vec{\omega}_j)$ };
         $Loop = .false.$ ;
      else
        Uniform sampling of  $r$ ;
        if  $0 < r < P_A(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)$  then
           $w = w + \frac{\partial_\varsigma k_a(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}{k_a(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}$ ;
          { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f^{eq}(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1})$ ;  $\partial_\varsigma \bar{f}_N = \partial_\varsigma \bar{f}_N + w f^{eq}(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1})$ };
           $Loop = .false.$ ;
        else if  $P_A(\vec{x}_{j+1}) < r < P_A(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma) + P_S(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)$  then
          Sampling of  $\vec{\omega}_{j+1}$ ;
           $w = w + \frac{\partial_\varsigma k_s(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}$ ;
        else
           $w = w + \frac{\partial_\varsigma k_n(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}{k_n(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}$ ;
        end
      end
    end
     $j = j + 1$ ;
  end
end
{ $\bar{f}_N$ ;  $\partial_\varsigma \bar{f}_N$ } = { $\frac{\bar{f}_N}{N}$ ;  $\frac{\partial_\varsigma \bar{f}_N}{N}$ };

```

Algorithm 2: The standard approach to the simultaneous evaluation of f and its sensitivity. $\partial_\varsigma \bar{f}_N$ is a Monte Carlo estimate of $\partial_\varsigma f(\vec{x}, \vec{\omega}, t, \varsigma)$ corresponding to the algorithmic reading of Eq.(7). It is constructed together with \bar{f}_N . Notations are described in the caption of Alg. 1. The incrementation of the Monte Carlo weight w is detailed in Appendix Appendix B

```

{ $\bar{f}_N = 0$  ;  $\partial_\zeta \bar{f}_N = 0$ };
foreach  $i$  in  $1 : N$  do
   $j = 0$ ;
   $\vec{x}_0 = \vec{x}$ ;
   $\vec{\omega}_0 = \vec{\omega}$ ;
   $t_0 = t$ ;
   $w = 0$ ;
   $Loop = .true.$ ;
  while  $Loop$  do
    Beer sampling of  $\lambda_j$ ;
     $t_{j+1} = t_j - \frac{\lambda_j}{c}$ ;
     $\vec{x}_{j+1} = \vec{x}_j - \lambda_j \vec{\omega}_j$ ;
    if  $t_{j+1} < 0$  then
      if  $\lambda_{\partial\Omega}^j < \lambda_j$  then
        Sampling of  $l_j \in [0, \lambda_{\partial\Omega}]$  according to  $p_L$ ;
         $w = w - \partial_\zeta k_e(\vec{x}_j - l_j \vec{\omega}_j, \varsigma) / p_L(l_j)$ ;
        { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$  ;  $\partial_\zeta \bar{f}_N = \partial_\zeta \bar{f}_N + w f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$ };
      else
        Sampling of  $l_j \in [0, ct_j]$  according to  $p_L$ ;
         $w = w - \partial_\zeta k_e(\vec{x}_j - l_j \vec{\omega}_j, \varsigma) / p_L(l_j)$ ;
        { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f_0(\vec{x}_j - ct_j \vec{\omega}_j, \vec{\omega}_j)$  ;  $\partial_\zeta \bar{f}_N = \partial_\zeta \bar{f}_N + w f_0(\vec{x}_j - ct_j \vec{\omega}_j, \vec{\omega}_j)$ };
      end
       $Loop = .false.$ ;
    else
      if  $\lambda_{\partial\Omega}^j < \lambda_j$  then
        Sampling of  $l_j \in [0, \lambda_{\partial\Omega}]$  according to  $p_L$ ;
         $w = w - \partial_\zeta k_e(\vec{x}_j - l_j \vec{\omega}_j, \varsigma) / p_L(l_j)$ ;
        { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$  ;  $\partial_\zeta \bar{f}_N = \partial_\zeta \bar{f}_N + w f_{\partial\Omega}(\vec{y}_{j+1}, \vec{\omega}_j)$ };
         $Loop = .false.$ ;
      else
        Sampling of  $l_j \in [0, \lambda]$  according to  $p_L$ ;
        Uniform sampling of  $r$ ;
        if  $0 < r < P_A(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)$  then
           $w = w + \left( \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)} - \partial_\zeta k_e(\vec{x}_j - l_j \vec{\omega}_j, \varsigma) / p_L(l_j) \right)$ ;
          { $\bar{f}_N = \bar{f}_N + f^{eq}(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1})$  ;  $\partial_\zeta \bar{f}_N = \partial_\zeta \bar{f}_N + w f^{eq}(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1})$ };
           $Loop = .false.$ ;
        else if  $P_A(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma) < r < P_A(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma) + P_S(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)$  then
          Sampling of  $\vec{\omega}_{j+1}$ ;
           $w = w + \left( \frac{\partial_\zeta k_s(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)}{k_s(\vec{x}_{j+1}, t_{j+1}, \varsigma)} - \partial_\zeta k_e(\vec{x}_j - l_j \vec{\omega}_j, \varsigma) / p_L(l_j) \right)$ ;
        else
           $w = w - \partial_\zeta k_e(\vec{x}_j - l_j \vec{\omega}_j, \varsigma) / p_L(l_j)$ ;
        end
      end
    end
     $j = j + 1$ ;
  end
end
{ $\bar{f}_N$  ;  $\partial_\zeta \bar{f}_N$ } = { $\frac{\bar{f}_N}{N}$  ;  $\frac{\partial_\zeta \bar{f}_N}{N}$ };

```

Algorithm 3: The alternative approach to the simultaneous evaluation of f and its sensitivity. It corresponds to the algorithmic reading of Eq.(13). Notations are described in the captions of Alg. 1 and Alg. 2. The incrementation of the Monte Carlo weight w is detailed in Appendix Appendix B

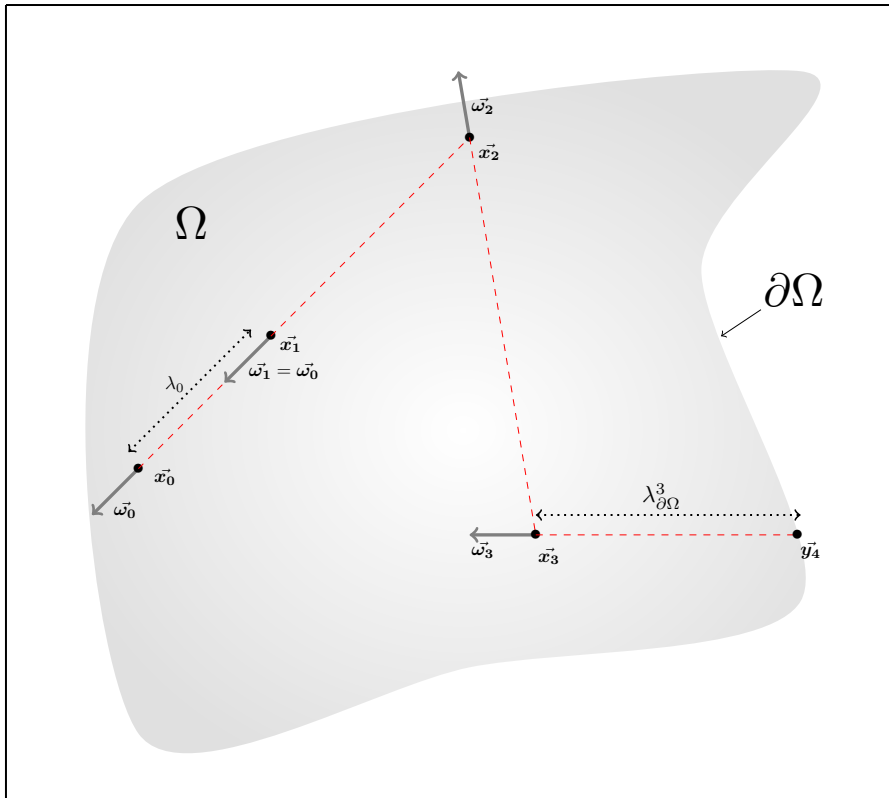


Figure D.1: Example of a backward-sampled path obtained from Alg. 1, 2 or 3. Ω is the geometrical domain and $\partial\Omega$ its boundary. \vec{x}_0 and $\vec{\omega}_0$ are the position and direction when starting the backward tracking (i.e. the end of the path) . This path is composed of one null-collision at location $\vec{x}_1 = \vec{x}_0 - \lambda_0 \vec{\omega}_0$ (the initial direction $\vec{\omega}_1$ is kept and therefore $\vec{\omega}_0 = \vec{\omega}_1$), two scatterings at locations \vec{x}_2 (from direction $\vec{\omega}_2$ to direction $\vec{\omega}_1$) and \vec{x}_3 (from direction $\vec{\omega}_3$ to direction $\vec{\omega}_2$), and one boundary intersection at location $\vec{y}_4 = \vec{x}_3 - \lambda_{\partial\Omega}^3 \vec{\omega}_3$.

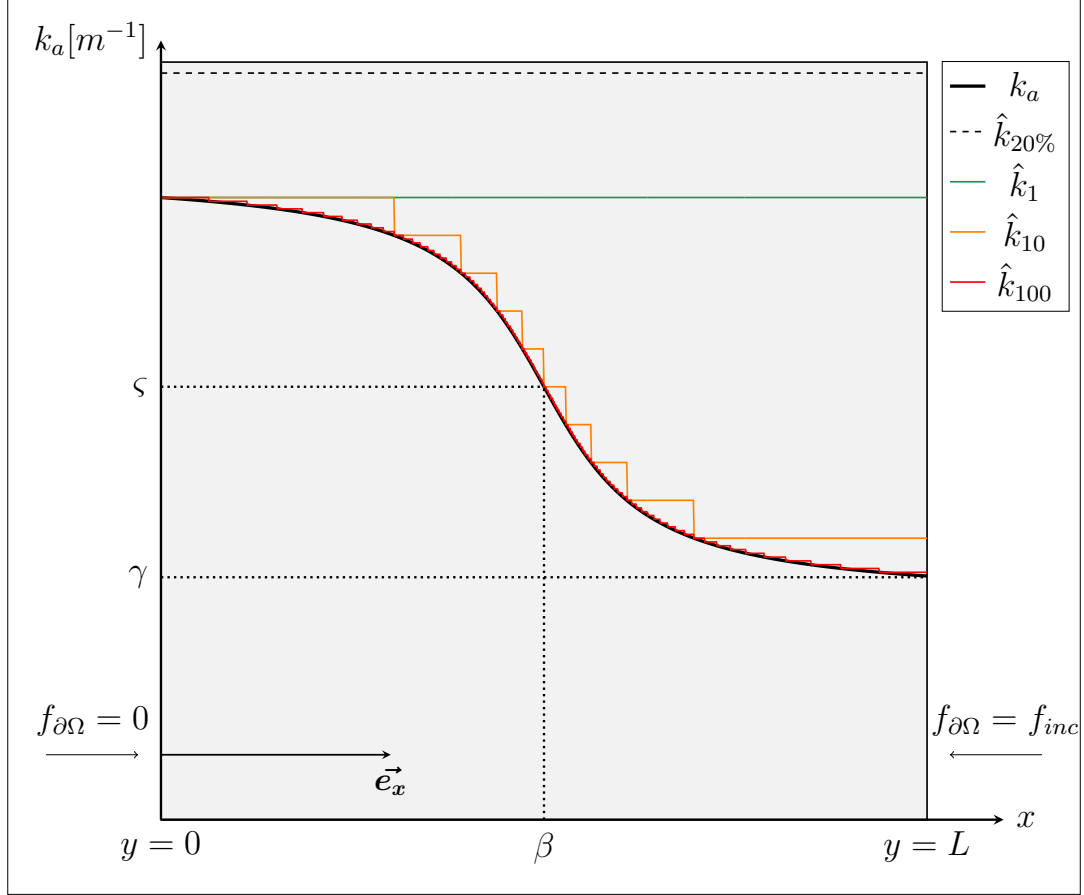


Figure D.2: The *heterogeneous-slab* configuration: a non diffusive heterogeneous column of length L . The absorption coefficient profile is $k_a(\vec{x}, \varsigma) = (\varsigma - \gamma) \frac{\text{atan}(-\alpha(\vec{x}-\beta) + \frac{\pi}{2})}{\pi/2} + \gamma$. Different \hat{k} profiles are used, closer and closer to $k_e \equiv k_a$: $\hat{k}_{20\%}$ is equal to $1.2\max(k_e)$ and \hat{k}_n is constant in pieces on the grid: \hat{k} is exactly equal to the maximum k_e -value inside a mesh and the grid is constructed in such a way that the variations of k_e are identical across each mesh). α, β, ς and γ are arbitrary parameters that allow us to choose the shape of the absorption coefficient profile, in particular, ς is the problem-parameter. The equilibrium distribution f^{eq} is null (no emission) and the boundary conditions are $f_{\partial\Omega}(L, -\vec{e}_x) = f_{inc}$ and $f_{\partial\Omega}(0, \vec{e}_x) = 0$. By choosing this k_e -profile, we can calculate the transmissivity and the sensibility analytically: $T = \exp(-(\varsigma - \gamma)K - \gamma L)$ and $\partial_\varsigma T = -K \exp(-(\varsigma - \gamma)K - \gamma L)$ where $K = \frac{1}{\varsigma/2} \left((L - \beta) \text{atan}(-\alpha L + \alpha\beta) + \beta \text{atan}(\alpha\beta) - \frac{1}{2\alpha} \log \left(\frac{1 + (\alpha\beta)^2}{1 + (-\alpha L + \alpha\beta)^2} \right) \right) + L$.

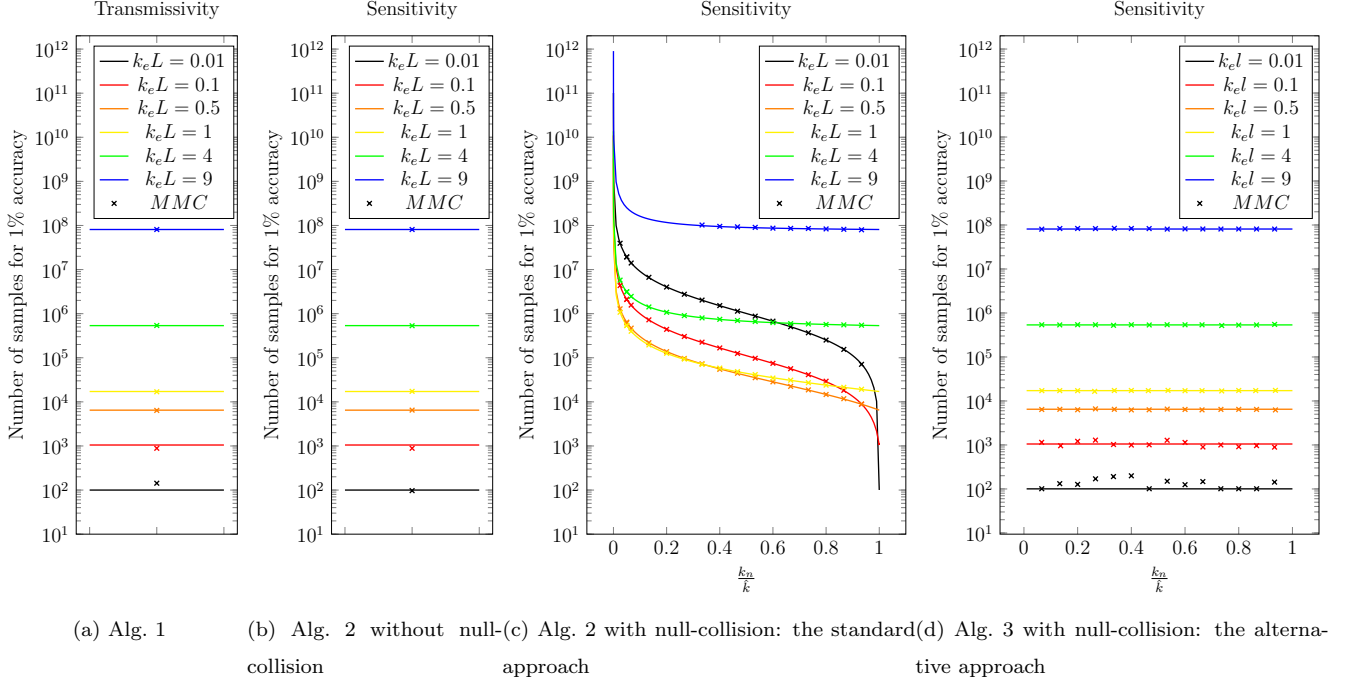


Figure D.3: Statistical convergence for the *homogeneous-slab* configuration: number of samples required to reach a 1% accuracy (N1%) when evaluating the slab transmissivity or its sensitivity as function of the ratio $\frac{k_n}{k}$ (i.e. the amount of null-collisions), for optical-thicknesses $k_e L \equiv k_a L$ ranging from 0.01 to 9. In this particular case the variances of Alg. 1, 2 and 3 are known analytically (see Appendix Appendix A) and therefore N1% is also known analytically. It is displayed using solid lines. Also displayed are some example Monte Carlo simulations, only confirming that the analytical prediction is correct. These theoretical analysis of statistical convergence are provided for the the following four algorithms: (a.) transmissivity estimation, with null-collision, using Alg. 1 (the standard null-collision algorithm described in Section. 2); (b.) sensitivity estimation, without null-collision, using Alg. 2 (the standard sensitivity evaluation algorithm described in Section. 2), here with $k_n \equiv 0$ which is possible in this particular case because k_e is homogeneous; (c.) sensitivity estimation, with null-collision, using the same standard approach as in (b.) (i.e. Alg. 2, but now with $k_n \neq 0$); (d.) sensitivity estimation, with null-collision, using the alternative approach (i.e. algorithm Alg. 3 described in Section. 3).

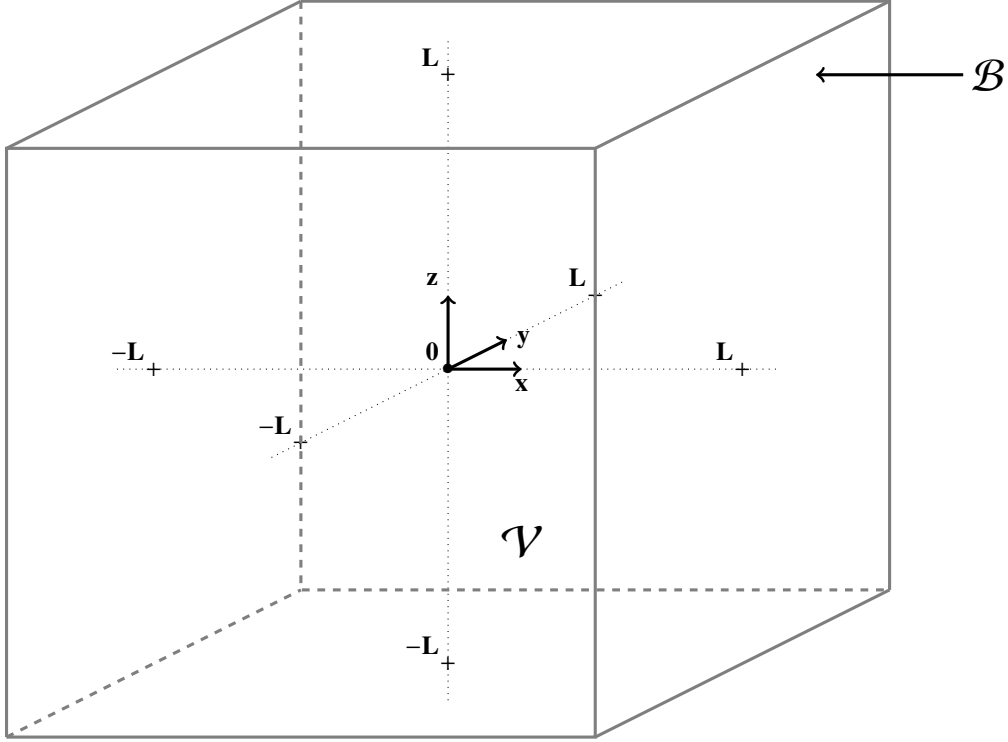


Figure D.4: The *heterogeneous-cube* configuration: the cube is of side $2L$, centred on \vec{O} , with $0K$ black faces perpendicular to the three axes of a cartesian coordinate system (\vec{O}, x, y, z) . The inside-temperature field is such that f^{eq} varies from $f^{eq} = f_{max}^{eq}$ (at the center of the face at $x = -L$) to $f^{eq} = 0$ (at $x = L$ and $(y = \pm L, z = \pm L)$): $f^{eq}(x, y, z) = \eta(x, y, z)f_{max}^{eq}$ with $\eta(x, y, z) = \frac{L-x}{2L} \left(1 - \sqrt{\frac{y^2+z^2}{2L^2}}\right)$. The fields of absorption and scattering coefficients follow the same spatial dependence: $k_a(x, y, z) = \eta(x, y, z)k_{a,max}$ and $k_s(x, y, z) = \eta(x, y, z)k_{s,max}$. The single-scattering phase function is that of Henyey-Greenstein with a uniform value of the asymmetry parameter g . The total extinction coefficient \hat{k}_n is chosen constant in pieces on a $n \times n \times n$ -regular grid, exactly equal to the maximum k_e -value inside each mesh. In particular, \hat{k}_1 is uniform on the whole cube and equal to $k_{a,max} + k_{s,max}$.

Transmissivity				
\hat{k}	T	σ	\bar{C}	\bar{R}
$\hat{k}_{20\%}$	0.327	5.179E-03	116.65	235.2
\hat{k}_1	0.327	5.358E-03	96.64	194.6
\hat{k}_5	0.327	5.264E-03	20.06	38.7
\hat{k}_{10}	0.332	4.984E-03	9.86	20.5
\hat{k}_{100}	0.335	5.285E-03	1.45	3.4
\hat{k}_{1000}	0.322	4.815E-03	0.72	1.8

(a) Evaluation of transmissivity T with Alg. 1.

Sensitivity with the standard approach				
\hat{k}	$\partial_\zeta T$	σ	$N_{1\%}$	\bar{R}
\hat{k}_1	-1.915E-03	5.910E-05	95E+03	194.6
\hat{k}_5	-1.8357E-03	6.347E-05	120E+03	38.7
\hat{k}_{10}	-1.868E-03	1.008E-04	304E+03	20.5
\hat{k}_{100}	-1.852E-03	2.250E-04	1516E+03	3.4
\hat{k}_{1000}	-1.491E-03	5.083E-04	-	1.8

(b) Evaluation of sensitivity $\partial_\zeta T$ with Alg. 2.

Sensitivity with the alternative approach				
\hat{k}	$\partial_\zeta T$	σ	$N_{1\%}$	\bar{R}
\hat{k}_1	-1.801E-03	2.836E-05	24E+03	288.4
\hat{k}_5	-1.838E-03	2.745E-05	22E+03	63.4
\hat{k}_{10}	-1.819E-03	2.720E-05	22E+03	37.7
\hat{k}_{100}	-1.822E-03	2.703E-05	22E+03	83.6
\hat{k}_{1000}	-1.807E-03	2.622E-05	20E+03	792.4

(c) Evaluation of sensitivity $\partial_\zeta T$ with Alg. 3.

Figure D.5: Simulation results for the *heterogeneous-slab* configuration: evaluation of the transmissivity T of a non diffusive heterogeneous column of length L where the absorption coefficient profile is such that $k_a(\vec{x}, \zeta)L = (\zeta - \gamma) \frac{\text{atan}(-\alpha(\vec{x}-\beta) + \frac{\pi}{2})}{\pi/2} + \gamma$ with $\zeta = 200, \gamma = 0.0, \alpha = 1000, \beta = 0.0005L$. T and $\partial_\zeta T$ are evaluated using $N = 10000$ samples. The exact solution can be obtained by solving the radiative transfer equation analytically: $T_{exact} = 0.326$ and $\partial_\zeta T_{exact} = -1.827E - 03$. $N_{1\%}$ is the number of paths that need to be sampled in order to reach $\sigma = \frac{T_{exact}}{100}$ for transmissivity or $\sigma = \frac{\partial_\zeta T_{exact}}{100}$ for sensitivity. \bar{C} is the average number of null-collision per path and \bar{R} the average number of random generation per path. Table D.5a confirms that the computation time decreases when \hat{k} gets closer to k_a : the average number of random generation per path decreases when \hat{k} is well adjusted because there are less null-collisions. Table D.5b highlights the fact that the better \hat{k} is adjusted, the greater is the standard deviation of the sensitivity estimator. With Table D.5c we see that with the alternative approach the standard deviation of the sensitivity estimator is independent of \hat{k} . The fact that \bar{R} increases when adjusting \hat{k} in Table D.5c is associated to the repeated sampling of L each time a mesh is crossed. This could be replaced with only one sample along the complete path but using importance sampling on the basis of the information carried by the acceleration grid (see Appendix C).

		Alternative approach						
$k_{a,max}L$	$k_{s,max}L$	\mathcal{A}	$\sigma_{\mathcal{A}}$	$\partial_{k_{a,max}}\mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{a,max}}\mathcal{A}}$	$\partial_{k_{s,max}}\mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{s,max}}\mathcal{A}}$	$t(s)$
0.1	0.1	-0.483582	8.58E-05	0.160386	8.37E-04	0.002091	1.72E-04	0.79
0.1	1.0	-0.481834	9.00E-05	0.176627	8.74E-04	0.001992	5.89E-05	1.28
0.1	3.0	-0.477867	9.92E-05	0.212956	9.53E-04	0.002097	4.17E-05	2.69
0.1	10.0	-0.463074	1.26E-04	0.342196	1.17E-03	0.002190	3.82E-05	10.91
1.0	0.1	-0.366069	2.09E-04	0.106597	1.69E-04	0.010256	4.19E-04	0.91
1.0	1.0	-0.356424	2.13E-04	0.110277	1.70E-04	0.010256	1.42E-04	1.31
1.0	3.0	-0.335872	2.20E-04	0.116637	1.72E-04	0.009890	9.37E-05	2.31
1.0	10.0	-0.276546	2.28E-04	0.125441	1.91E-04	0.007140	6.91E-05	7.16
3.0	0.1	-0.219088	2.21E-04	0.049387	6.51E-05	0.011163	5.03E-04	1.04
3.0	1.0	-0.209163	2.18E-04	0.047957	6.92E-05	0.010262	1.63E-04	1.28
3.0	3.0	-0.190149	2.10E-04	0.044937	7.74E-05	0.008717	9.89E-05	1.90
3.0	10.0	-0.143655	1.83E-04	0.035626	9.88E-05	0.005079	6.15E-05	4.16
10.0	0.1	-0.071489	1.19E-04	0.008151	3.47E-05	0.003764	4.13E-04	1.00
10.0	1.0	-0.068583	1.15E-04	0.007778	3.54E-05	0.002880	1.30E-04	1.08
10.0	3.0	-0.063426	1.06E-04	0.006771	3.69E-05	0.002478	7.59E-05	1.27
10.0	10.0	-0.050710	8.50E-05	0.004806	4.00E-05	0.001365	4.27E-05	1.93

Figure D.6: The *heterogeneous-cube* configuration: $f_{max}^{eq} = 1$, $g = 0$, $\vec{\alpha}_0 = (0, 0, 0)$, and $N = 10^6$ samples. Evaluation of $\mathcal{A} = \frac{\mathcal{A}}{4\pi k_a(\vec{\alpha}_0) f_{max}^{eq}}$ (the stationary net-power density) and its sensitivities $\partial_{k_{a,max}}\mathcal{A}$ and $\partial_{k_{s,max}}\mathcal{A}$ using the alternative approach of Alg. 3 for $\hat{k}_1 = k_{a,max} + k_{s,max}$. We check here that the alternative approach recovers the results of Table 1 in [1] with $\zeta = 1$ (the extinction criterion defined in [5]). The computation times displayed in the last column correspond to an Intel Core i5 - 2.5Ghz without parallelization.

	Standard approach				Alternative approach			
	$\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}}$	$\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}}$	$\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}}$	$\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}}$
\hat{k}_1	0.110196	1.97E-04	0.010612	1.75E-04	0.110236	1.69E-04	0.010652	1.43E-04
\hat{k}_{2^3}	0.110598	2.25E-04	0.011006	2.06E-04	0.110258	1.69E-04	0.010666	1.44E-04
\hat{k}_{10^3}	0.110202	3.95E-04	0.010506	3.85E-04	0.110345	1.69E-04	0.010649	1.43E-04
\hat{k}_{100^3}	0.109576	1.04E-03	0.010004	1.03E-03	0.110104	1.69E-04	0.010532	1.43E-04
\hat{k}_{1000^3}	0.114101	2.72E-03	0.014621	2.72E-03	0.110199	1.69E-04	0.010719	1.43E-04

(a) $\zeta = 1$

	Standard approach				Alternative approach			
	$\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}}$	$\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}}$	$\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{a,max}} \mathcal{A}}$	$\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}$	$\sigma_{\partial_{k_{s,max}} \mathcal{A}}$
\hat{k}_1	0.110457	8.41E-05	0.010622	1.02E-04	0.110407	8.79E-05	0.010572	8.14E-05
\hat{k}_{2^3}	0.110434	1.15E-04	0.010648	1.21E-04	0.110365	9.99E-05	0.010579	7.92E-05
\hat{k}_{10^3}	0.110251	2.19E-04	0.010490	2.17E-04	0.110393	1.17E-04	0.010632	7.26E-05
\hat{k}_{100^3}	0.110180	5.92E-04	0.010401	5.90E-04	0.110406	1.22E-04	0.010627	6.99E-05
\hat{k}_{1000^3}	0.112980	1.82E-03	0.013008	1.82E-03	0.110533	1.22E-04	0.010560	6.95E-05

(b) $\zeta = 0.1$

Figure D.7: The *heterogeneous-cube* configuration for $k_{a,max}L = 1$, $k_{s,max}L = 1$, $f_{max}^{eq} = 1$, $g = 0$, $\mathbf{x}_0 = (0,0,0)$ and $N = 10^6$ samples. $\zeta = 1$ in Table D.7a and $\zeta = 0.1$ in D.7b. Simulations are made for various adjustments of the \hat{k} profile to the true profile of $k_e = k_a + k_s$ (using the \hat{k}_n notation as defined in Fig. D.2). These Tables confirm the conclusion of Fig. D.5: the standard deviation of the alternative approach is independent of \hat{k} whereas it was increasing when \hat{k} was getting close to k_e in the standard approach.

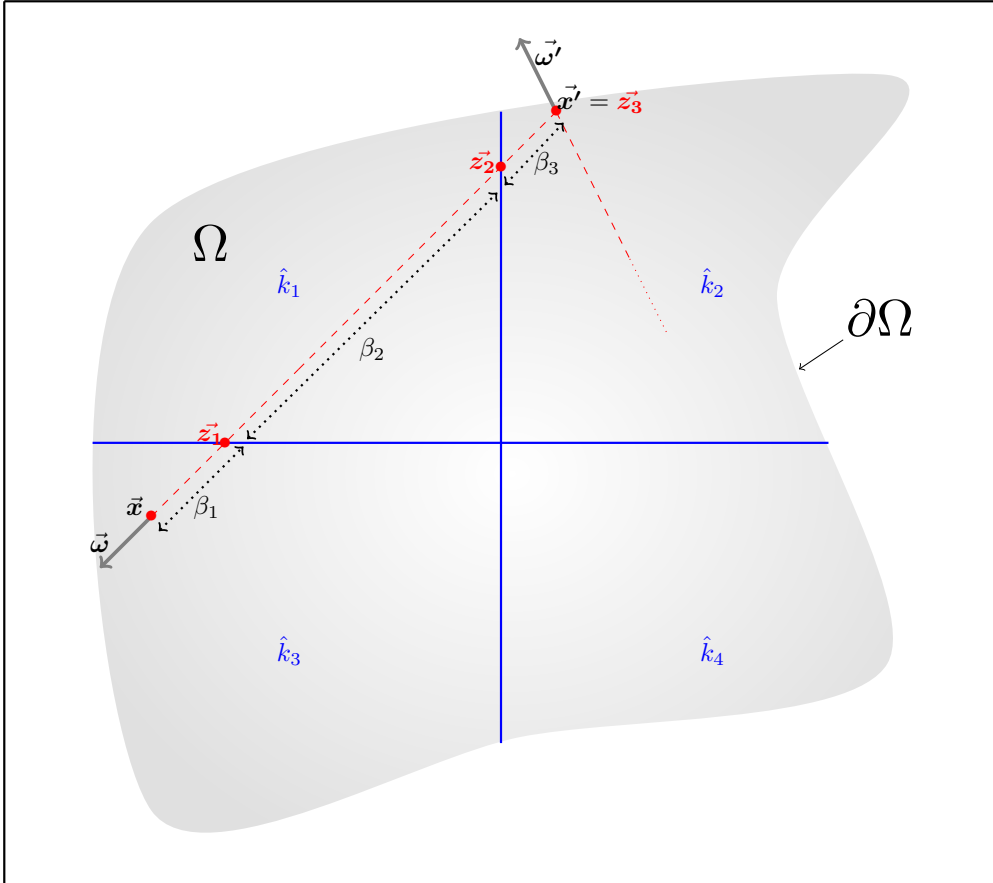


Figure D.8: In this 2D sketch, Ω is partitioned into four areas and \hat{k} is constant in pieces on these areas. We denote \hat{k}_1 , \hat{k}_2 , \hat{k}_3 and \hat{k}_4 these constants. \vec{x} and $\vec{\omega}$ are the location and direction at the start of the backward tracking of the path. $\vec{x}' = \vec{z}_3$ is the location of a scattering event (from $\vec{\omega}'$ to $\vec{\omega}$). \vec{z}_1 and \vec{z}_2 are grid-collisions. $\beta_1 = \|\vec{z}_1 - \vec{x}'\|$, $\beta_2 = \|\vec{z}_2 - \vec{z}_1\|$ and $\beta_3 = \|\vec{z}_3 - \vec{z}_2\|$.

Acknowledgments

We acknowledge support from the Agence Nationale de la Recherche (ANR, grant HIGH-TUNE ANR-16-CE01-0010, <http://www.umr-cnrm.fr/high-tune>), from the french Programme National de Teledetection Spatiale (PNTS-2016-05), from Region Occitanie (Projet CLE-2016 EDStar) and from the French Minister of Higher Education, Research and Innovation for the PhD scholarship of the first author.

References

- [1] M. Galtier, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, A. Khuong, et al., Integral formulation of null-collision monte carlo algorithms, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 125 (2013) 57–68.
- [2] H. Skullerud, The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field, *Journal of Physics D: Applied Physics* 1 (11) (1968) 1567.
- [3] E. Woodcock, T. Murphy, P. Hemmings, S. Longworth, Techniques used in the gem code for monte carlo neutronics calculations in reactors and other systems of complex geometry, in: *Proc. Conf. Applications of Computing Methods to Reactor Problems*, Vol. 557, 1965.
- [4] S. Lin, J. Bardsley, The null-event method in computer simulation, *Computer Physics Communications* 15 (3-4) (1978) 161–163.
- [5] M. Galtier, S. Blanco, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, M. Roger, C. Spiesser, G. Terrée, Radiative transfer and spectroscopic databases: A line-sampling monte carlo approach, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 172 (2016) 83–97.
- [6] M. Galtier, M. Roger, F. André, A. Delmas, A symbolic approach for the identification of radiative properties, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 196 (2017) 130–141.
- [7] P. Kutz, R. Habel, Y. K. Li, J. Novák, Spectral and decomposition tracking for rendering heterogeneous volumes, *ACM Transactions on Graphics (TOG)* 36 (4) (2017) 111.
- [8] J. Novák, I. Georgiev, J. Hanika, W. Jarosz, Monte carlo methods for volumetric light transport simulation, in: *Computer Graphics Forum*, Vol. 37, Wiley Online Library, 2018, pp. 551–576.
- [9] J. Novák, A. Selle, W. Jarosz, Residual ratio tracking for estimating attenuation in participating media., *ACM Trans. Graph.* 33 (6) (2014) 179–1.
- [10] M. Raab, D. Seibert, A. Keller, Unbiased global illumination with participating media, in: *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2006*, Springer, 2008, pp. 591–605.
- [11] J. Dauchet, J.-J. Bézian, S. Blanco, C. Caliot, J. Charon, C. Coustet, M. El Hafi, V. Eymet, O. Farges, V. Forest, et al., Addressing nonlinearities in monte carlo, *Scientific reports* 8 (1) (2018) 13302.

- [12] J. Dauchet, S. Blanco, J.-F. Cornet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, The practice of recent radiative transfer monte carlo advances and its contribution to the field of microorganisms cultivation in photobioreactors, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 128 (2013) 52–59.
- [13] J. Charon, S. Blanco, J.-F. Cornet, J. Dauchet, M. El Hafi, R. Fournier, M. K. Abboud, S. Weitz, Monte carlo implementation of schiff s approximation for estimating radiative properties of homogeneous, simple-shaped and optically soft particles: Application to photosynthetic micro-organisms, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 172 (2016) 3–23.
- [14] G. Terrée, M. E. Hafi, S. Blanco, R. Fournier, J. Dauchet, J. Gautrais, Addressing the gas kinetics boltzmann equation with branching paths statistics, *arXiv preprint arXiv:1712.02900*.
- [15] N. Villefranque, F. Couvreur, R. Fournier, S. Blanco, C. Cornet, V. Eymet, V. Forest, J.-M. Tregan, Path-tracing Monte Carlo Libraries for 3D Radiative Transfer in Cloudy Atmospheres, *arXiv e-prints* (2019) arXiv:1902.01137arXiv:1902.01137.
- [16] J. Dauchet, S. Blanco, J.-F. Cornet, R. Fournier, Calculation of the radiative properties of photosynthetic microorganisms, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 161 (2015) 60–84.
- [17] A. De Lataillade, S. Blanco, Y. Clergent, J.-L. Dufresne, M. El Hafi, R. Fournier, Monte carlo method and sensitivity estimations, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 75 (5) (2002) 529–538.
- [18] J. Delatorre, G. Baud, J.-J. Bézian, S. Blanco, C. Caliot, J.-F. Cornet, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, et al., Monte carlo advances and concentrated solar applications, *Solar Energy* 103 (2014) 653–681.
- [19] M. Roger, S. Blanco, M. El Hafi, R. Fournier, Monte carlo estimates of domain-deformation sensitivities, *Physical review letters* 95 (18) (2005) 180601.
- [20] M. Roger, M. El Hafi, R. Fournier, S. Blanco, A. De Lataillade, V. Eymet, P. Perez, Applications of sensitivity estimations by monte carlo methods, in: *ICHMT DIGITAL LIBRARY ONLINE*, Begel House Inc., 2004.
- [21] S. Blanco, R. Fournier, Short-path statistics and the diffusion approximation, *Physical review letters* 97 (23) (2006) 230604.
- [22] G. Terrée, S. Blanco, M. El Hafi, R. Fournier, J. Y. Rolland, Diffusion approximation and short-path statistics at low to intermediate knudsen numbers, *EPL (Europhysics Letters)* 110 (2) (2015) 20007.
- [23] G. Mikhailov, *Optimization of Weighted Monte Carlo Methods*, Springer-Verlag, 1995.

7.4 Conclusion

Les deux premières perspectives nous semblent importantes du point de vue théorique, car elles sont au stade actuel nos seules alternatives à Monte-Carlo Picard. Elles restent néanmoins loin des applications compte tenu de la difficulté liée au couplage entre les transferts de chaleur.

En revanche, les retombées applicatives associées au paragraphe 7.3 sur l'analyse des sensibilités sont immédiates. Nous choisissons de présenter cet article comme une perspective car aucune mise en œuvre n'a été réalisée dans ce manuscrit. Mais nous n'entrevoions aucune difficulté particulière liée au calcul de sensibilité en transferts thermiques non-linéaires via MCP, notamment grâce au récent travail de Victor Gattepaille qui s'est appuyé sur la proposition du paragraphe 7.3 pour développer une technique de calcul des sensibilités sur un problème non-linéaire similaire au notre, dans le contexte du génie des procédés. On imagine donc reprendre sa technique et l'adapter à nos cas d'étude très prochainement, de façon à ce que nos algorithmes n'évaluent plus seulement une valeur de température au sein du système, mais aussi, et de façon simultanée, les sensibilités de cette température aux paramètres du modèle pertinents pour l'analyse ou le dimensionnement.

De façon générale, notre discours n'a réservé qu'une place minimale aux outils d'analyse, qui sont pourtant l'un des atouts majeurs des algorithmes de Monte-Carlo. Ces outils tiennent une place importante dans la pratique du thermicien, permettant une compréhension plus profonde des mécanismes de transfert que ne le permet la seule observation des résultats de simulation. En nous tournant vers la thermique non linéaire, nous n'avons jamais perdu de vue cette question et le calcul de sensibilité n'est qu'une première étape dans ce que nous envisageons à court terme sur ce terrain. Lorsque l'équipe de développement de Stardis pense à la mise en œuvre de MCP il est bien sûr question aussi de tous les "à côté" du calcul principal qui ont fait la force de l'outil dans sa version linéaire :

- La **visualisation des chemins** permet de comprendre la provenance des différentes contributions et leur propagation à la traversée du domaine. Par exemple, dans le contexte de l'habitat, elle permet d'identifier et de visualiser des ponts thermiques dans un bâtiment. Selon notre proposition, il reste envisageable de visualiser les chemins, même si ils sont branchés. Mais la question sera d'en faire une lecture. Dans un premier temps, ne serait-ce que dans un geste de simplification de la visualisation, il serait probablement judicieux de ne visualiser que les trajets principaux (c'est-à-dire les chemins ayant remonté les valeurs de température qui nous servent de poids), en omettant les branches secondaires nécessaires à leur échantillonnage. La lecture offerte par cette visualisation ne sera bien sûr pas aussi riche que dans le linéaire et il sera important de chercher à comprendre le sens de cette information, puis de réfléchir à l'information supplémentaire qui pourrait être apportée par un complément de visualisation correspondant aux branches secondaires. En tout cas, dans le linéaire, pouvoir visualiser les chemins est vécu concrètement comme un atout interprétatif très fort dans les contextes d'ingénierie thermique auxquels nous sommes confrontés et il y aura sans aucun doute une motivation forte à essayer de préserver une part de cet atout dans le non linéaire.
- Dans le même esprit, le **stockage du propageur** permet de comprendre comment la grandeur calculée résulte des contributions de chacune des sources, volumiques

ou surfaciques, de chacune des températures imposées à la limite, et de la condition initiale. Par rapport à la visualisation des chemins, qui nous informe déjà sur la façon de visiter le système et donc sur la façon d'aller chercher ces contributions, le calcul du propagateur permet de quantifier ces informations. Malheureusement le propagateur n'a de sens que si le modèle étudié est linéaire : dans ce cas la statistique des chemins est indépendante des sources (par exemple) et on peut se servir des chemins échantillonnés dans une configuration donnée, archiver les informations nécessaires sur cette statistique, pour penser le transfert avec d'autres sources, d'autres températures à la limite, d'autres conditions initiales. En thermique non-linéaire, on perd cette notion de propagateur. Mais comme pour la visualisation des chemins, y-a t'il un intérêt à archiver la statistique de propagation correspondant aux chemins principaux ? peut-on archiver les informations associées aux chemins secondaires ? Et là encore il y aura très probablement une motivation forte à extraire des éléments d'analyse quantitative de la statistique des chemins, même si leur force d'information s'avère moins grande que dans le linéaire.

- A partir d'un calcul de Monte Carlo évaluant une grandeur, typiquement pour nous une température T à une position et un temps donnés, la technique du **calcul symbolique** consiste à construire simultanément les paramètres d'une fonction que l'on puisse ensuite utiliser pour comprendre comment T change lorsqu'on modifie un des paramètres du système, mettons un coefficient d'échange convectif h_F à une interface solide/fluide. La technique du calcul de sensibilité, telle que nous l'avons introduite au paragraphe 7.3, nous permettrait d'évaluer $\partial_{h_F} T$; le calcul symbolique nous permet d'évaluer la fonction $T(h_F)$ elle-même, y compris pour des valeurs de h_F éloignées de celle qui a été utilisée dans le Monte Carlo de départ. Cette technique est assez récente et reste un objet de recherche à part entière, mais un point important pour le présent travail est qu'aucun élément de cette technique de calcul symbolique n'est intrinsèquement associé au linéaire (par opposition à ce que nous venons de discuter concernant la visualisation des chemins et le propagateur). A titre d'illustration, l'une des méthodes les plus employées pour construire une fonction symbolique, soit $T(h_F)$ si nous gardons notre exemple, consiste à faire appel à un échantillonnage "par importance" à chaque fois que la réalisation du chemin fait appel à des probabilités qui dépendent de h_F . En termes d'intégrale, si on note h_{MC} la valeur de h_F qui est utilisée dans le calcul de Monte Carlo effectué (celle correspondant à notre configuration de référence), à chaque fois que l'on rencontre le motif

$$\dots \int_{D_X} p_X(x, h_F) dx \dots w(x)$$

c'est à dire que l'on fait une réalisation d'une variable aléatoire X dont la loi p_X dépend de h_F , pour construire un chemin qui ramènera un poids $w(x)$, on écrit simplement

$$\dots \int_{D_X} p_X(x, h_{MC}) dx \dots w(x) \frac{p_X(x, h_F)}{p_X(x, h_{MC})}$$

c'est à dire que même si c'est h_{MC} qui a été utilisé pour le tirage aléatoire, il suffit rajouter une pondération au poids pour évaluer la température pour une valeur de h_F différente. On stocke donc tous les rapports $\frac{p_X(x, h_F)}{p_X(x, h_{MC})}$, pour chaque chemin, comme des éléments fonctionnels (des fonctions de h_F) et ensuite on évalue $T(h_F)$ comme

une moyenne sur les chemins, exactement comme dans le Monte Carlo de départ, sauf que le résultat est une fonction. Bien sûr ces quelques phrases ne permettent pas une appropriation du concept, mais le point à retenir est le suivant : les motifs fonctionnels apparaissent lors des échantillonnages, il y en aura donc plus avec nos arbres branchés que pour la thermique linéaire, et la forme fonctionnelle sera peut être difficile à manipuler, mais on peut envisager d'explorer le calcul symbolique en non linéaire sans renouvellement du concept.

Ces dernières idées sont très embryonnaires, mais elles sont tellement au cœur de la pratique actuelle de Monte Carlo que nous pouvons pas imaginer de suite à nos propositions sans une exploration de la façon d'utiliser l'information portée par les chemins pour autre chose que le calcul de la grandeur, pour aider l'analyse.

Sur la mise en oeuvre du développement de Picard modifié, nous observons bien souvent que la troncature de la hiérarchie à un ordre assez faible permet d'obtenir des approximations excellentes de la grandeur calculée. Du point de vue de l'espace des chemins qui en résulte, nous obtenons une topologie assez surprenante, car les seuls branchements (en nombre faible mais nécessaire) qui assurent le fonctionnement du processus, sont « localisés » spatialement ou temporellement à proximité de la branche principale. Tout se passe comme si il suffisait d'explorer finement autour de cette branche, puis dès que l'on est un peu à l'écart, on peut remonter l'information par un processus linéaire. A cet instant, nous ne portons aucun signifiant, et pour autant si l'on compare l'espace des chemins complets (sans troncature) et l'espace des chemins tronqués, la différence est aussi grande que l'on veut. La "densité d'information" portée par l'essentiel des chemins semble tendre vers zéro sans que nous n'ayons la moindre intuition à y attacher. Nous pensons qu'il faudra explorer avec attention ce résultat, qui pourrait nous éclairer différemment sur la pensée du non-linéaire que nous pouvons porter sur nos systèmes thermiques.

Annexe A

Rappels Probabilités et Notations

Dans cette thèse,

- les variables aléatoires seront notées en majuscule, (une exception sera autorisé, on notera la température T en majuscule et sa variable aléatoire associé Θ)
- la densité de probabilité associée à la v.a X sera notée p_X ,
- la fonction de répartition associée à la v.a X sera notée F_X ,
- l'écart-type associée à la v.a X sera notée σ_X ,
- et l'espérance associée à la v.a X sera notée $\mathbb{E}_X(X)$,

Voici deux ouvrages de référence pour une introduction à la théorie des Probabilités [27, 28].

A.1 Variables Aléatoires

Phénomène aléatoire

On parle de *phénomène aléatoire* lorsque, en recommençant une expérience plusieurs fois, la réalisation de cette expérience est variable et semble imprédictible. L'exemple le plus connu est celui du lancé de dé. Les réalisations possibles sont l'obtention d'une des six faces, une fois le dé immobilisé. Intuitivement, nous pouvons affirmer (lorsque le dé est équilibré) que la probabilité d'obtenir une des six faces est $1/6$. Cette notion intuitive est directement liée à la fréquence d'apparition d'une réalisation et est basée sur le vécu de chacun. Elle n'est donc pas très fiable, notamment lorsque l'on complexifie l'expérience. Pour expliquer un phénomène aléatoire, nous utilisons la Théorie des probabilités. Elle a pour but d'analyser les phénomènes aléatoires en élaborant un modèle "fidèle" de l'expérience. En ce sens, la théorie des probabilités est très proche de la physique où l'objectif est de construire un modèle permettant d'analyser un phénomène physique. Cette théorie repose sur un vocabulaire bien particulier :

Construction de l'univers Ω

La première étape consiste à nommer les objets que l'on étudie. Pour cela, nous construisons un ensemble Ω appelé l'*univers*, qui est constitué de l'ensemble des *réalisations* possibles de l'expérience. Ces réalisations sont généralement notées ω . Dans notre exemple du lancé de dé équilibré, les réalisations possibles sont l'obtention de l'une des six faces. Ainsi,

$\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6\}$ où ω_i est la réalisation "obtention de la face i ".

Les évènements

Ensuite nous définissons les "objets" dont on veut calculer la probabilité. Ces objets sont généralement appelés *évènement*. Un évènement est un élément de l'ensemble des parties de Ω . L'ensemble des évènements possible est appelé *tribu* et est noté \mathcal{A} . La tribu doit vérifier plusieurs propriétés (pour être en accord avec la notion intuitive de probabilité) : il est naturel de pouvoir évaluer la probabilité du complémentaire d'un évènement ainsi que l'union et l'intersection d'un ensemble d'évènements. Ces contraintes nous permettent de définir rigoureusement la notion de tribu comme suit :

Définition 5 (*Tribu*)

Un sous-ensemble \mathcal{A} de l'ensemble des parties de Ω est une tribu si :

1. $\Omega \in \mathcal{A}$
2. \mathcal{A} est stable par passage au complémentaire : $A \in \mathcal{A} \implies A^c \in \mathcal{A}$
3. \mathcal{A} est stable par réunion dénombrable : $A_i \in \mathcal{A}, i \in \mathbb{N} \implies \cup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in \mathcal{A}$

Voici deux exemples d'évènements lors d'un lancé de dé :

- Si A est l'évènement «obtention de la face 1 ou de la face 5», alors $A = \{\omega_1, \omega_5\}$.
- Si B est l'évènement «obtention de la face 4», alors $B = \{\omega_4\}$.

Remarquons que nous écrivons $B = \{\omega_4\}$ et non $B = \omega_4$. En effet, $\{\omega_4\}$ est bien un élément de \mathcal{A} (c'est un singleton) alors que ω_4 est un élément de Ω i.e. une réalisation.

La mesure de probabilité \mathbb{P}

Pour évaluer quantitativement la probabilité d'évènements qui sont plus ou moins susceptibles de se produire, nous utilisons la notion de *mesure de probabilité* : la probabilité d'un évènement sera définie comme la mesure (que l'on notera \mathbb{P}) de cet évènement (i.e. on mesure la probabilité d'un évènement). Une mesure de probabilité doit vérifier les axiomes suivant :

Définition 6 (*Mesure de probabilité*)

Une application \mathbb{P} est une mesure de probabilité si :

1. \mathbb{P} est à valeurs dans $[0,1]$.
2. $\mathbb{P}(\Omega) = 1$
3. Soient A et B deux évènements disjoints quelconques, alors $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B)$

De ces trois axiomes, il est découle clairement que \mathbb{P} vérifie les propriétés suivantes :

Propriété 2 (*Mesure de probabilité*)

Soit \mathbb{P} une mesure de probabilité, soient A et B deux évènements, alors :

- $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B)$
- $\mathbb{P}(\emptyset) = 0$
- $\mathbb{P}(A^c) = 1 - \mathbb{P}(A)$
- Si $A \subset B$, alors $\mathbb{P}(A) \leq \mathbb{P}(B)$
- Si $A \subset B$, alors $\mathbb{P}(B \setminus A) = \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A)$

où l'on considère A et B deux évènements de la tribu \mathcal{A} et la notation $B \setminus A = \{\omega \in B; \omega \notin A\}$. Il est intéressant de remarquer que ces propriétés permettent de calculer la probabilité d'un évènement inconnu à partir de la probabilité d'un ou plusieurs autres évènements connus.

Probabilité et Modélisation

Lorsque l'on étudie un phénomène aléatoire, nous cherchons à construire un univers Ω avec la plus grande précision possible. Malheureusement, si l'expérience est trop complexe, il paraît difficile voire impossible de décrire mathématiquement cette expérience. C'est là qu'intervient l'étape de modélisation qui consiste à simplifier le problème dans le but de pouvoir l'expliquer mathématiquement en définissant la mesure de probabilité \mathbb{P} . En général, deux situations se présentent :

- *Cas Discret (dénombrable)* : Lorsque le phénomène aléatoire est discret, (par exemple un lancé de dé), il suffit d'associer à chaque **évènement élémentaire** $\{\omega\}$ un nombre $p(\omega) \in [0, 1]$ pour définir la probabilité de n'importe quel évènement $A \in \mathcal{A}$. Ce nombre $p(\omega)$ doit être choisi le plus proche possible de la notion intuitive de la probabilité que l'évènement élémentaire $\{\omega\}$ soit réalisé pour que notre modèle soit "valable". J'insiste sur le fait que ces nombres $p(\omega)$ sont choisis et non calculés (à moins de faire des stats ?). Ainsi, si A est un évènement, alors (dans le cas discret) A peut toujours s'écrire comme union dénombrable d'évènements élémentaires i.e. $A = \cup_{\omega \in A} \omega$. On peut alors lui associer la probabilité $\mathbb{P}(A)$ telle que :

$$\mathbb{P}(A) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{\omega \in A} \omega\right) = \sum_{\omega \in A} \mathbb{P}(\{\omega\}) = \sum_{\omega \in A} p(\omega) \quad (\text{A.1})$$

Par exemple, si on considère l'évènement $A = \text{"obtenir la face 1 ou la face 5"}$, alors $\mathbb{P}(A) = \mathbb{P}(\{\omega_1, \omega_5\}) = p(\omega_1) + p(\omega_5) = 1/6 + 1/6 = 1/3$ où $\{\omega_1\}$ et $\{\omega_5\}$ sont vus comme des évènements distincts.

- *Cas Continu* : dans le cas où Ω est non dénombrable, c'est un peu plus compliqué. En effet, la probabilité d'un évènement élémentaire est toujours nulle i.e. $\forall \omega \in \Omega, \mathbb{P}(\{\omega\}) = 0$. Par conséquent, si l'on calcule la probabilité d'un évènement $A \in \mathcal{A}$ quelconque de manière analogue à l'Eq. (A.1), on obtient :

$$\mathbb{P}(A) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{\omega \in A} \omega\right) = \sum_{\omega \in A} \mathbb{P}(\{\omega\}) = 0 \quad (\text{A.2})$$

Ainsi, contrairement au cas discret, il n'est pas possible de définir la mesure de probabilité \mathbb{P} à l'aide de la somme des probabilités de chaque évènement élémentaire. Pour contourner cette difficulté, l'idée est de définir la probabilité \mathbb{P} en exprimant la mesure non plus à l'aide d'une somme, mais à l'aide d'une intégrale :

$$\mathbb{P}(A) = \int_A d\mathbb{P}(\omega)$$

Ainsi, définir la mesure de probabilité \mathbb{P} revient à définir une mesure $d\mathbb{P}$ sur la tribu \mathcal{A} . En pratique, cette mesure $d\mathbb{P}$ n'est jamais vraiment explicitée, car nous travaillons directement avec la variable aléatoire décrivant notre expérience.

Variables Aléatoires

Dans la pratique, on attribue une valeur numérique aux réalisations issue d'une expérience. Par exemple, si on joue au jeu suivant :

Jeu du lancé de dé : Lors d'un lancé de dé équilibré, si le numéro de la face obtenue est supérieur ou égal à 5 alors le joueur gagne 2 euros, si le numéro de la face est 1 alors il gagne 0.5 euros, sinon il perd 1 euros.

Il paraît naturel d'associer aux évènements "obtention de la face 5 ou 6", "obtention de la face 1" et "obtention de la face 2 ou 3 ou 4" les valeurs 2, 0.5 et -1 respectivement. L'application réalisant cette association est appelée **variable aléatoire**, généralement notée X :

$$\left\{ \begin{array}{l} X : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \\ \omega_1 \mapsto 0.5 \\ \omega_2 \mapsto -1 \\ \omega_3 \mapsto -1 \\ \omega_4 \mapsto -1 \\ \omega_5 \mapsto 2 \\ \omega_6 \mapsto 2 \end{array} \right. \quad (\text{A.3})$$

Il est d'usage de noter les variables aléatoires en majuscule, et les réalisations en minuscules. Les réalisations de la variable aléatoire X , (en abrégé dans toute la suite, elle est notée v.a) sont appelés **issues** : dans notre exemple les issues possibles sont 0.5, -1 et 2. Dans toutes les applications de ce manuscrit, X sera à valeurs dans \mathbb{R} (on se restreint ici aux valeurs réelles, le principe est le même si ce n'est pas le cas).

Bien sûr, de la même façon que dans l'espace probabilisé, nous allons construire une tribu sur \mathbb{R} de tel sorte à pouvoir mesurer les objets qui nous intéressent. Dans notre exemple, nous pourrions choisir la tribu \mathcal{B} suivante :

$$\mathcal{B} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}, \emptyset, \\ \{-1\}, \mathbb{R} \setminus \{-1\} \\ \{0.5\}, \mathbb{R} \setminus \{0.5\}, \\ \{2\}, \mathbb{R} \setminus \{2\}, \\ \{-1, 0.5\}, \mathbb{R} \setminus \{-1, 0.5\}, \\ \{-1, 2\}, \mathbb{R} \setminus \{-1, 2\}, \\ \{0.5, 2\}, \mathbb{R} \setminus \{0.5, 2\}, \\ \Omega, \mathbb{R} \setminus \Omega \end{array} \right\} \quad (\text{A.4})$$

\mathcal{B} étant constituée de 16 éléments. En pratique cette tribu naturelle \mathcal{B} est très compliquée à expliciter. C'est pour cette raison que nous la remplaçons systématiquement par la tribu borélienne notée $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ qui la contient par construction. Cette tribu borélienne est la tribu engendrée par les intervalles et les singletons (de \mathbb{R}) i.e. l'ensemble d'ensembles qui est stable par union dénombrable, par passage au complémentaire et contenant l'espace tout entier \mathbb{R} .

Loi image

Maintenant que nous avons à disposition la variable aléatoire qui permet de faire le lien entre les réalisations de l'expérience et les issues, nous pouvons nous poser la question suivante : comment évaluer la probabilité d'un borélien (un élément de la tribu borélienne $\mathcal{B}(\mathbb{R})$) ? En effet, on aimerait évaluer la probabilité de gagner 2 euros ($X = 2$), de perdre 1 euros ($X = -1$) ou encore que le gain soit positif ($X > 0$). Pour évaluer ces probabilités, nous

utilisons une mesure construite à partir de la mesure de probabilité \mathbb{P} et de la variable aléatoire X elle-même. Cette nouvelle mesure sera appelée **mesure image** et est notée \mathbb{P}_X :

$$\mathbb{P}_X = \mathbb{P}(X^{-1})$$

Bien sûr, pour que cette mesure \mathbb{P}_X soit bien définie, il est nécessaire que l'image réciproque par X de tous les boréliens soit un élément de la tribu de départ i.e. $\forall B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}), X^{-1}(B) \in \mathcal{A}$. Si \mathbb{P}_X vérifie cette propriété, alors on dit qu'elle est **mesurable**.

Dans notre exemple la probabilité que le gain soit positif est :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_X(X > 0) &= \mathbb{P}_X([0, +\infty[) \\ &= \mathbb{P}(X^{-1}(\{0.5, 2\})) \\ &= \mathbb{P}(\{\omega_1, \omega_5, \omega_6\}) \\ &= \mathbb{P}(\{\omega_1\}) + \mathbb{P}(\{\omega_5\}) + \mathbb{P}(\{\omega_6\}) \\ &= \frac{1}{6} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6} \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{A.5}$$

Nous avons écrit $\mathbb{P}_X(X > 0)$ au lieu de $\mathbb{P}_X([0, +\infty[)$, c'est un abus de langage que l'on retrouve très souvent dans la littérature. On qualifie généralement \mathbb{P}_X de **loi de X** .

Les probabilités dans la vie de tous les jours

Dans les applications rencontrées dans la vie de tous les jours, on n'explique que rarement (voire jamais) la façon dont on modélise l'expérience ainsi que l'espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$: on travaille naturellement avec la variable aléatoire et sa loi i.e. avec X et \mathbb{P}_X . De la même façon, on confond une réalisation ω et l'évènement $\{\omega\}$. Voici deux exemples classiques de confusion :

- Lorsqu'on lance un dé équilibré, nous "savons" que la probabilité d'obtenir une des six faces est 1/6 mais nous n'avons pas conscience immédiatement que cette probabilité est obtenue une fois le processus de modélisation terminé !
- Lorsque l'on travaille avec des variables aléatoires, on écrit souvent : «soit X une variable aléatoire de loi \mathbb{P}_X » au lieu de dire «soit X une variable aléatoire définie sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ où \mathbb{P} est une mesure de probabilité modélisant l'expérience d'étude, telle que la mesure image soit \mathbb{P}_X ».

Exemple : Modélisation de la durée de vie d'une ampoule : Absence de mémoire

On s'intéresse à l'expérience suivante : une personne met en fonctionnement une ampoule d'éclairage domestique standard à l'instant 0 puis dès que l'ampoule est hors fonctionnement (grillée), l'expérience s'arrête. On se pose la question suivante :

Quelle est la probabilité \mathcal{P} que l'ampoule fonctionne à l'instant t^* ?

Si l'on veut répondre avec une précision infinie à cette question, nous devons prendre en compte l'état de l'ampoule, l'état de la personne autant psychologique que physique, une description complète de l'environnement, et tout un tas d'autres paramètres plus compliqués les uns que les autres. Il est alors totalement impossible d'imaginer une description mathématique complète de l'expérience.

Pour éviter cette difficulté, nous allons utiliser un modèle élaboré à partir de l'hypothèse suivante :

Hypothèse sans mémoire : On suppose que la probabilité que l'ampoule fonctionne à l'instant t sachant qu'elle fonctionnait à l'instant s (avec $t < s$), est égale à la probabilité que l'ampoule fonctionne à l'instant $t - s$.

Formellement, la probabilité \mathcal{P} vérifie :

$$\mathcal{P} = \mathbb{P}_T([t^*, +\infty]) = \int_{[t^*, +\infty]} d\mathbb{P}_T(t)$$

où T est la variable aléatoire qui à une réalisation de l'expérience associe l'instant où l'ampoule grille. Pour calculer la probabilité \mathcal{P} , il suffit d'identifier la mesure $d\mathbb{P}_T$. Cette mesure est définie à partir de l'hypothèse sans mémoire :

$$\begin{aligned} \forall t \geq s > 0, \quad & \mathbb{P}_T(t < T | s < T) = \mathbb{P}_T(t - s < T) \\ \implies & \frac{\mathbb{P}_T((t < T) \cap (s < T))}{\mathbb{P}_T(s < T)} = \mathbb{P}_T(t - s < T) \\ \implies & \mathbb{P}_T(t < T) = \mathbb{P}_T(t - s < T) \mathbb{P}_T(s < T) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Il est alors bien connu que T suit une loi exponentielle de paramètre α strictement positif caractérisant la durée de vie de l'ampoule. Ainsi, par définition on obtient :

$$\mathbb{P}_T(t < T) = \int_t^{+\infty} d\mathbb{P}_T(t') = \exp(-\alpha t) \quad (\text{A.7})$$

L'Eq. (A.7) étant vraie pour tout $t \in \mathbb{R}_+$, on en déduit :

$$\mathcal{P} = \exp(-\alpha t^*) \quad (\text{A.8})$$

Ainsi, la probabilité que l'ampoule fonctionne à l'instant t^* est $\exp(-\alpha t^*)$ où α est un paramètre caractérisant la qualité de l'ampoule. Il est intéressant de remarquer que la loi de T est définie de la façon suivante :

$$d\mathbb{P}_T(t) = \alpha \exp(-\alpha t) dt \quad (\text{A.9})$$

où dt représente la mesure de Lebesgue sur les réels. La loi définie par cette mesure image s'appelle **loi exponentielle** de paramètre α , notée $\mathcal{E}(\alpha)$.

Démonstration : Preuve Loi exponentielle dans un cadre

On note $f(t) = \mathbb{P}_T(t < T)$. En utilisant l'hypothèse sans mémoire, on sait que :

$$\forall (s, t) \in \mathbb{R}_+^2, f(t + s) = f(t)f(s)$$

En prenant $t > 0$ et $s = 0$, on obtient $f(t) = f(0)f(t)$ donc $f(0) = 1$ (car f est supposée non nulle). Pour montrer que $f(1)$ est positif, il suffit de remarquer que $f(1) = f(1/2)^2 \geq 0$. Ensuite, pour montrer que $f(1)$ est non nulle, nous allons utiliser un raisonnement par l'absurde : supposons que $f(1) = 0$, alors

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \quad 0 = f(1) = f\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n} + \dots + \frac{1}{n}\right) = \left(f\left(\frac{1}{n}\right)\right)^n$$

par continuité de f en 0, on en déduit que $f(0) = 0$ d'où l'absurdité. On en déduit que $f(1) > 0$ et on note $\alpha = -\ln(f(1))$.

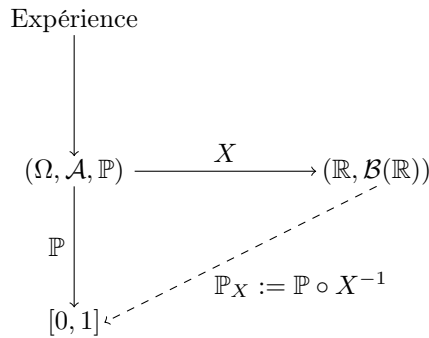
Soient $(p, q) \in \mathbb{N}^{*2}$, alors $f(p) = f(1)^p = \exp(-\alpha p)$, et $f(1/q) = f(1)^{1/q} = \exp(-\alpha/q)$, donc

$$f\left(\frac{p}{q}\right) = \exp\left(-\alpha \frac{p}{q}\right)$$

Cette égalité étant vraie pour tout entier positif p et q , donc pour tout rationnel p/q , on en déduit par continuité de f , par densité de \mathbb{Q}_+ dans \mathbb{R}_+ et passage à la limite que :

$$\forall t \in \mathbb{R}_+, f(t) = \exp(-\alpha t)$$

■



A.2 Fonction de Répartition, Densité de Probabilité et Espérance

A.2.1 Fonction de répartition

Dans cette section, nous définissons les outils fondamentaux en Théorie des probabilités. Ces outils ont été créés pour répondre à plusieurs questions, notamment la suivante :

Quand est-ce que deux variables aléatoires X et Y sont indiscernables i.e. obéissent à la même loi ?

Si X et Y ont même loi, on note $X \sim Y$ au lieu de $X = Y$ pour spécifier que l'égalité a lieu entre les lois et non entre les variables aléatoires : X et Y peuvent avoir une même loi mais ne pas décrire du tout la même expérience.

Par définition, si deux variables aléatoires à valeurs réelles ont même loi, alors la probabilité de tous événements suivant la loi de X et la même que celle suivant la loi de Y i.e. $\forall B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathbb{P}_X(B) = \mathbb{P}_Y(B)$. En pratique, il est impossible de tester l'égalité pour tous boréliens vu leurs nombres. En revanche, il est facile de vérifier l'égalité entre leurs **fonctions de répartition** :

Définition 7 (*Fonction de répartition*)

Soit X une variable aléatoire réelle. Alors sa fonction de répartition notée F_X est définie de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathbb{R}, F_X(x) &:= \mathbb{P}_X (] - \infty, x]) \\ &= \mathbb{P} (\{\omega; X(\omega) < x\}) \\ &= \mathbb{P} (X \leq x) \end{aligned} \tag{A.10}$$

La fonction de répartition caractérise entièrement la loi \mathbb{P}_X :

Propriété 3 (*Fonction de répartition*)

Soient X et Y deux variables aléatoires quelconques, alors :

$$\boxed{X \sim Y \iff F_X = F_Y}$$

i.e. la fonction de répartition caractérise la loi, ou encore, la variable aléatoire est entièrement déterminée par sa fonction de répartition.

En effet, soit $[a, b] \subset \mathbb{R}$ un intervalle quelconque, alors

$$\mathbb{P}_X([a, b]) = F_X(b) - F_X(a) \quad (\text{A.11})$$

Par conséquent, pour montrer que deux variables aléatoires sont indiscernables i.e. $X \sim Y$, il suffit de montrer l'égalité entre leurs fonctions de répartition i.e. $F_X = F_Y$. Les fonctions de répartition possèdent de nombreuses propriétés :

Propriété 4 (*Fonction de répartition*)

Soit X une variable aléatoire de fonction de répartition F_X , alors :

- $0 < F_X < 1$
- F_X est croissante, continue à droite avec une limite à gauche en tout point
- $\lim_{x \rightarrow -\infty} F_X(x) = 0$ et $\lim_{x \rightarrow +\infty} F_X(x) = 1$

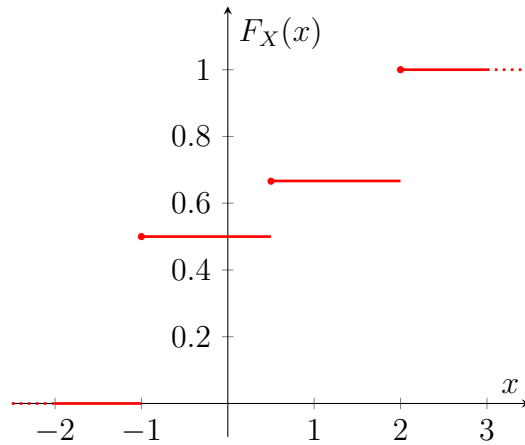
Exemple 1 : Jeu du lancé de dé, cas Discret

Si nous reprenons l'exemple du lancé de dé, alors

$$F_X(x) = \mathbb{P}_X(]-\infty, x])$$

$$= \begin{cases} \mathbb{P}_X(\{\emptyset\}), & \text{si } x < -1 \\ \mathbb{P}_X(\{-1\}), & \text{si } x < 0.5 \\ \mathbb{P}_X(\{-1, 0.5\}), & \text{si } x < 2 \\ \mathbb{P}_X(\{-1, 0.5, 2\}), & \text{si } x \leq 2 \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

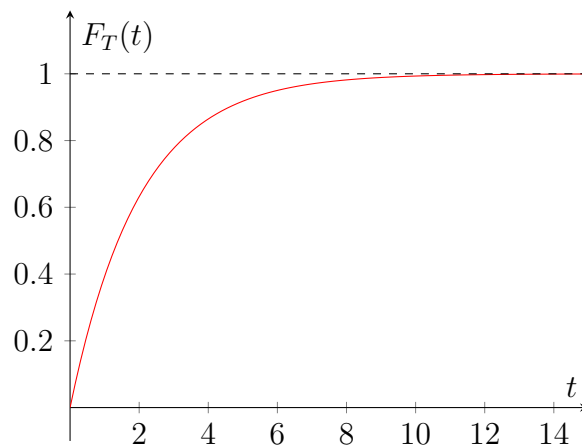
$$= \begin{cases} 0, & \text{si } x < -1 \\ 3/6, & \text{si } x < 0.5 \\ 4/6, & \text{si } x < 2 \\ 1, & \text{si } x \leq 2 \end{cases}$$



Exemple 2 : Durée de vie d'une ampoule, cas Continu

Nous avons montré que si $T \sim \mathcal{E}(\alpha)$ alors $d\mathbb{P}_T(t) = \alpha \exp(-\alpha t) dt$, donc par définition :

$$\begin{aligned}
 F_T(t) &= \mathbb{P}_T([\!-\infty, t]) \\
 &= \mathbb{P}_T([0, t]) \\
 &= \int_0^t \alpha \exp(-\alpha s) ds \\
 &= 1 - \exp(-\alpha t)
 \end{aligned}
 \tag{A.13}$$



A.2.2 Densité de probabilité

Soit X une variable aléatoire à valeurs réelles. Soit $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ un borélien. Quel est la probabilité $\mathbb{P}_X(B)$?

Pour répondre à cette question, la première idée consiste à utiliser la fonction de répartition et exprimer B à l'aide d'une union d'intervalles et/ou de singleton. Un autre outil bien plus pratique existe :

Définition 8 (*Densité de probabilité, cas continu*)

Soit X une variable aléatoire réelle continue dont la fonction de répartition est de classe

$C^1(\mathbb{R})$. Alors la densité de probabilité de X notée p_X est définie de la façon suivante :

$$\forall x \in \mathbb{R}, p_X(x) := F'_X(x) \quad (\text{A.14})$$

on dit également que X admet une densité.

Lorsque la fonction de répartition n'est pas de classe C^1 , par exemple dans le cas où la variable aléatoire est discrète, nous utilisons la théorie des distributions pour construire la densité de probabilité :

Définition 9 (Densité de probabilité, cas discret)

Soit X une variable aléatoire réelle discrète prenant comme valeurs $\{x_k, k \in I\}$ avec la probabilité p_k . Alors la densité de probabilité de X notée p_X est définie de la façon suivante :

$$\forall x \in \mathbb{R}, p_X(x) := \sum_{k \in I} p_k \delta_{x_k}(x) \quad (\text{A.15})$$

Remarque : comme dans le cas continu, p_x n'est rien d'autre que la dérivée au sens des distributions de F_X .

La densité de probabilité permet d'exprimer simplement la probabilité suivant la loi de X d'un borélien :

Propriété 5 (Densité de probabilité)

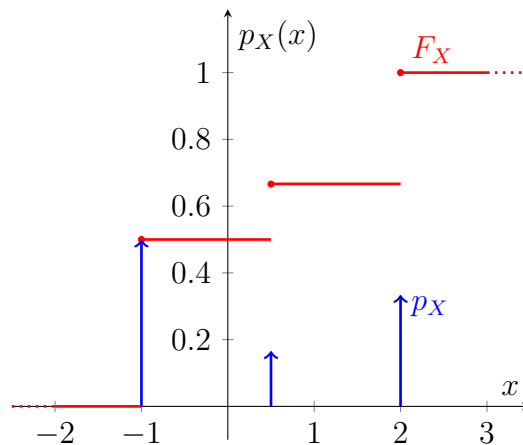
Soit X une variable aléatoire réelle, de densité de probabilité p_X . Soit $B \subset \mathcal{B}(\mathbb{R})$ un borélien, alors

$$\mathbb{P}_X(B) = \int_B p_X(x) dx$$

Exemple 1 : Jeu du lancé de dé, cas Discret

Si nous reprenons l'exemple du lancé de dé, alors

$$p_X(x) = \frac{1}{2} \delta_{-1}(x) + \frac{1}{6} \delta_{0.5}(x) + \frac{1}{3} \delta_2(x) \quad (\text{A.16})$$

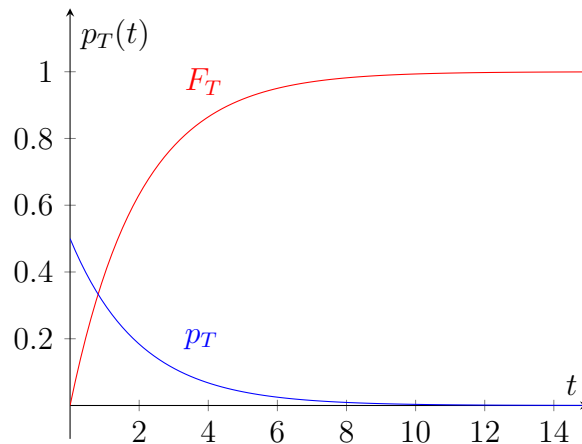


Exemple 2 : Durée de vie d'une ampoule, cas Continu

Nous avons montré que si $T \sim \mathcal{E}(\alpha)$ alors $d\mathbb{P}_T(t) = p_T(t)dt = \alpha \exp(-\alpha t) dt$, donc par définition :

$$p_T(t) = \alpha \exp(-\alpha t) \quad (\text{A.17})$$

Voici une illustration avec $\alpha = 0.5$.



A.2.3 Espérance

Soit X une variable aléatoire à valeur réelle. Quel est la valeur moyenne que l'on pourrait espérer obtenir à l'issue d'une réalisation ?

Au lieu de parler de la valeur moyenne que l'on pourrait espérer obtenir à l'issue d'une réalisation, on parle de l'espérance d'une variable aléatoire :

Définition 10 (*Espérance*)

Soit X une variable aléatoire réelle . Alors l'espérance notée $\mathbb{E}_X(X)$ est définie de la façon suivante :

$$\mathbb{E}_X(X) := \int_{\Omega} X d\mathbb{P} = \int_{\mathbb{R}} x d\mathbb{P}_X(x) \quad (\text{A.18})$$

à condition que X soit intégrable. Si X est une variable aléatoire de densité de probabilité p_X tel que l'application $x \mapsto |x|p_X(x)$ soit intégrable (p_X est positive), alors on a :

$$\mathbb{E}_X(X) = \int_{\mathbb{R}} xp_X(x)dx \quad (\text{A.19})$$

Exemple 1 : Jeu du lancé de dé, cas Discret

Si nous reprenons l'exemple du lancé de dé, alors

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_X(X) &= \int_{\mathbb{R}} xp_X(x)dx \\ &= \frac{1}{2}(-1) + \frac{1}{6}0.5 + \frac{1}{3}2 \\ &= 0.25 \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Exemple 2 : Durée de vie d'une ampoule, cas Continu

Nous avons montré que si $T \sim \mathcal{E}(\alpha)$ alors $d\mathbb{P}_T(t) = p_T(t)dt = \alpha \exp(-\alpha t) dt$, donc par définition :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_T(T) &= \int_{\mathbb{R}} t p_T(t) dt \\ &= \int_{\mathbb{R}} t \alpha \exp(-\alpha t) dt \\ &= \frac{1}{\alpha}\end{aligned}\tag{A.21}$$

A.2.3.1 Généralisation de l'espérance à des fonctions de v.a

Le théorème suivant permet de généraliser la notion d'espérance à la fonction d'une variable aléatoire :

Théorème 2 (de transfert)

La variable aléatoire $\psi(X)$ admet une espérance si et seulement si ψp_X est intégrable, où ψ est une fonction. Si c'est le cas, alors :

$$\mathbb{E}(\psi(X)) = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) p_X(x) dx$$

A partir du théorème de transfert, on déduit la propriété fondamentale de l'espérance suivante :

Propriété 6 (Linéarité de l'Espérance)

Soit X une variable aléatoire admettant une espérance. Soit ϕ une application réelle à valeurs réelles, alors :

$$\mathbb{E}_X(\phi(X)) = \phi(\mathbb{E}_X(X))$$

c'est-à-dire que l'espérance est linéaire.

Le caractère linéaire de l'espérance est à l'origine de l'efficacité des Méthodes de type Monte-Carlo :

Considérons une grandeur A telle que :

$$A = \mathbb{E}_X(\psi(\mathbb{E}_Y(\phi(X, Y))))$$

où X et Y sont des variables aléatoires réelles de densité de probabilité p_X et p_Y respectivement, ϕ est une fonction réelle à valeurs réelles linéaire et ψ une fonction quelconque.

Pour estimer la grandeur A à partir d'un algorithme de Monte-Carlo, la première stratégie consiste à estimer une première espérance $\mathbb{E}_Y(\phi(X, Y)) \simeq B(X)$ puis une seconde $\mathbb{E}_X(\psi(B(X)))$. L'inconvénient de cette stratégie, sans parler de la difficulté liée à la propagation des erreurs, est qu'elle est inexploitable lorsque le nombre d'espérances emboîtées est grand.

La deuxième stratégie consiste à exprimer la grandeur A comme une unique espérance

en utilisant le caractère linéaire de l'espérance :

$$\begin{aligned}
 A &= \int_{\mathbb{R}} p_X(x) dx \phi \left(\int_{\mathbb{R}} p_Y(y) dy \psi(x, y) \right) \\
 &= \int_{\mathbb{R}} p_X(x) dx \int_{\mathbb{R}} p_Y(y) dy \phi(\psi(x, y)) \\
 &= \mathbb{E}_X (\mathbb{E}_Y (\phi(\psi(X, Y)))) \\
 &= \mathbb{E}_{\vec{X}} (\phi(\psi(\vec{X})))
 \end{aligned}$$

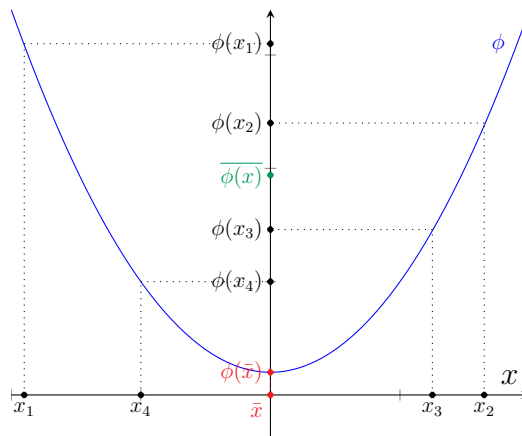
où $\vec{X} = (X, Y)$ est un couple de variables aléatoires de densité de probabilité $p_X \times p_Y$ sur \mathbb{R}^2 . Il est alors trivial de développer un algorithme de Monte-Carlo évaluant la grandeur A , la construction de la barre d'erreur étant naturelle.

Malheureusement, lorsque l'application ϕ est non-linéaire, il n'est plus possible d'invertir l'espérance et ϕ et donc d'exprimer la grandeur A comme une unique espérance. L'inégalité de Jensen met cette propriété en évidence.

Propriété 7 (Inégalité de Jensen)

Si ϕ est une fonction convexe de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , X une variable aléatoire réelle telle que $(x \mapsto xp_X(x))$ et ϕp_X soient intégrables, alors :

$$\phi(\mathbb{E}(X)) \leq \mathbb{E}(\phi(X)) \quad (\text{A.22})$$



Exemple : Inégalité de Jensen

Soit X une variable aléatoire suivant une loi uniforme sur $[-1, 1]$. Soit l'application $\psi : x \mapsto x^2$, alors :

$$\begin{cases} \mathbb{E}_X(\psi(X)) = 2/3 \\ \psi(\mathbb{E}_X(X)) = 0 \end{cases}$$

A.2.4 Variance et Ecart-Type

Comment quantifier la dispersion/variabilité d'une variable aléatoire ?

Pour caractériser la "variabilité" d'une variable aléatoire, on utilise la notion de variance qui correspond au moment centré d'ordre 2. La variance caractérise la dispersion de la densité de probabilité de la variable aléatoire par rapport à son espérance :

Définition 11 (*Variance*)

Soit X une variable aléatoire réelle de carré intégrable. On appelle variance de X , et on note $\text{Var}(X)$, la quantité :

$$\text{Var}(X) := \mathbb{E}_X \left((X - \mathbb{E}_X(X))^2 \right) \quad (\text{A.23})$$

La racine $\sqrt{\text{Var}(X)}$ est appelé l'écart-type, généralement noté σ_X .

Bien sûr, la variance n'a de sens que si elle est nulle (dans ce cas la variable aléatoire est constante), ou si l'on connaît avec précision la densité de probabilité : par exemple, dans le cas où N suit une loi normale de moyenne μ et de variance σ_N^2 , alors on peut montrer que :

$$\begin{cases} \mathbb{P}_N(\mu - \sigma_N < N < \mu + \sigma_N) \simeq 0.6827 \\ \mathbb{P}_N(\mu - 2\sigma_N < N < \mu + 2\sigma_N) \simeq 0.9545 \\ \mathbb{P}_N(\mu - 3\sigma_N < N < \mu + 3\sigma_N) \simeq 0.9973 \end{cases}$$

Exemple 1 : Jeu du lancé de dé, cas Discret

Si nous reprenons l'exemple du lancé de dé, alors

$$\begin{aligned} \text{Var}(X) &= \mathbb{E}_X \left((X - \mathbb{E}_X(X))^2 \right) \\ &= \mathbb{E}_X(X^2) - \mathbb{E}_X(X)^2 \\ &= \frac{1}{2}(-1)^2 + \frac{1}{6}(0.5)^2 + \frac{1}{3}(2)^2 - 0.25^2 \\ &= 1.8125 \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Exemple 2 : Durée de vie d'une ampoule, cas Continu

Nous avons montré que si $T \sim \mathcal{E}(\alpha)$ alors $d\mathbb{P}_T(t) = p_T(t)dt = \alpha \exp(-\alpha t) dt$, donc par définition :

$$\begin{aligned} \text{Var}(T) &= \mathbb{E}_T \left((T - \mathbb{E}_T(T))^2 \right) \\ &= \mathbb{E}_T(T^2) - \mathbb{E}_T(T)^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}} t^2 \alpha \exp(-\alpha t) dt - (1/\alpha)^2 \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

A.3 Échantillonnage d'une variable aléatoire

Les méthodes de simulation numérique de lois probabilistes se basent sur l'existence d'un générateur de nombres suivant une loi uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Le but d'un tel générateur uniforme est de simuler une suite aléatoire de nombres indépendants de loi uniforme sur $[0, 1]$. Pour simuler une variable aléatoire continue à partir d'un générateur uniforme, on utilise la propriété suivante :

Propriété 8 (*Echantillonnage d'une variable aléatoire continue par Inversion*)

Si U est une variable aléatoire uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, et X une variable aléatoire à valeur réelle de fonction de répartition F_X . On note G le pseudo-inverse de F , qui est la fonction définie sur $]0, 1[$ par

$$G(u) = \inf \{x \in \mathbb{R}; F_X(x) \geq u\} \quad (\text{A.26})$$

alors $G(U)$ à même loi que X , i.e.

$$X \sim G(U) \tag{A.27}$$

Remarque : Si F_X est strictement croissante et sans discontinuité, alors $G = F_X^{-1}$.

Démonstration : Pour tout $x \in \mathbb{R}$ et tout $u \in]0, 1[$, on a l'équivalence

$$G(u) \leq x \iff u \leq F_X(x) \tag{A.28}$$

on en déduit que

$$\mathbb{P}(G(U) \leq x) = \mathbb{P}(U \leq F_X(x)) = F_X(x) \tag{A.29}$$

Ainsi, par définition on a $F_{G_U} = F_X$ et on en déduit via l'égalité entre les fonctions de répartition (Prop 3), l'égalité entre les lois $X \sim G(U)$. ■

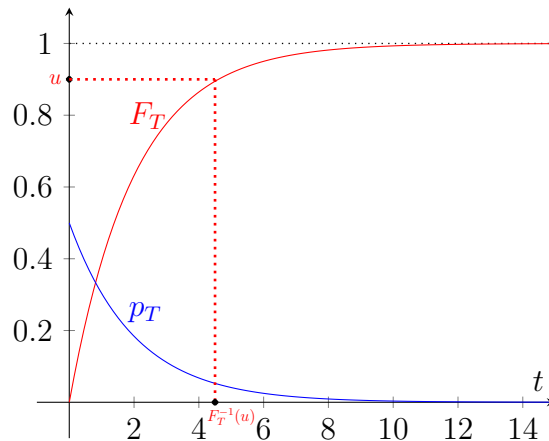
Exemple [Echantillonnage d'une loi exponentielle] : Soit $T \sim \mathcal{E}(\alpha)$ une loi exponentielle de paramètre α , alors on sait que

$$F_T(t) = 1 - \exp(-\alpha t) \tag{A.30}$$

Cette fonction étant strictement croissante et continue, on a $G = F_T^{-1}$, donc :

$$G(t) = F_T^{-1} = -\frac{1}{\alpha} \ln(1 - t)$$

En utilisant la Propriété 8, on en déduit que $T \sim G(U) = F_T^{-1}(U) = -\frac{1}{\alpha} \ln(1 - U)$ où U suit une loi uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Ainsi, pour échantillonner une réalisation de la variable aléatoire T il suffit de générer un nombre aléatoire u suivant U puis d'évaluer $-\frac{1}{\alpha} \ln(1 - u)$ qui peut être considéré comme une réalisation de la variable aléatoire T . Voici une illustration du principe d'inversion :



Ainsi, une fois la fonction de distribution inversée, il devient extrêmement rapide d'échantillonner une réalisation. En revanche, cette méthode n'est pas toujours efficace, car il est parfois extrêmement difficile de calculer la fonction inverse. Dans ce cas, il est possible d'utiliser différentes techniques d'inversion, comme la *méthode de dichotomie*, la *méthode de la fausse position*, la *méthode de la sécante* ou encore la *méthode de Newton*.

Annexe B

Construction de la fonction de Green en Milieu-Semi-Infini $1D$ et dans un segment $1D$ par la méthode image

B.1 Milieu Semi-Infini $1D$

Soit l'équation de la chaleur en milieu semi-infini en dimension 1 ($\Omega = [a, +\infty[$), avec une conductivité homogène :

$$\rho C \partial_t T(t, \vec{x}) = \lambda \partial_{x^2}^2 T(t, \vec{x}), \quad (t, \vec{x}) \in [t_I, +\infty[\times [a, +\infty[\quad (\text{B.1})$$

où l'on note la masse volumique ρ , la capacité calorifique C et la conductivité λ .

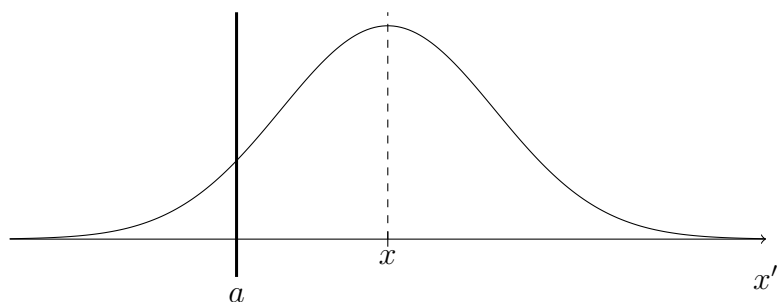
Notre objectif, est de construire la fonction de Green associée. La FG $G(\vec{x}, t | \vec{x}', t')$ est interprétée comme propageant une impulsion de Dirac du point $(\vec{x}, t) \in \Omega \setminus \partial\Omega \times \mathbb{R}$, jusqu'au point $(\vec{x}', t') \in \bar{\Omega} \times \mathbb{R}$ de façon reverse. Nous avons vu que cette propagation est entièrement définie dans le cadre des Processus Stochastique faisant émerger le notion de trajectoires. Pour simplifier la lecture, nous choisissons de conserver cette idée de trajectoire en parlant de densité de particules pour décrire G , ces particules se déplaçant dans le domaine spatialement et temporellement suivant le processus stochastique associé (pour la conduction le Mouvement Brownien).

La méthode image consiste alors à déterminer la densité des particules qui sont restées confinées durant $[t', t]$ dans le milieu semi-infini $[a, +\infty[$.

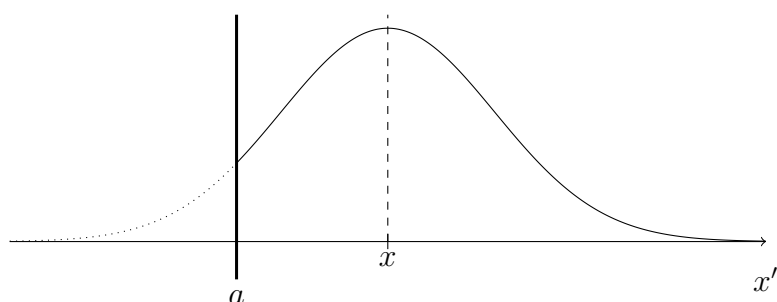
Nous avons montré qu'à l'instant t' , la densité est distribuée suivant une gaussienne de moyenne x et d'écart type $\sigma_{t-t'} = \sqrt{2D(t-t')}$ en milieu infini. Ne connaissant que cette information sur la densité de particules, ***l'idée est de travailler en milieu infini et de retirer les particules qui sont passées au moins une fois par la frontière*** :

- En milieu infini, nous savons que la distribution des particules à l'instant t' est :

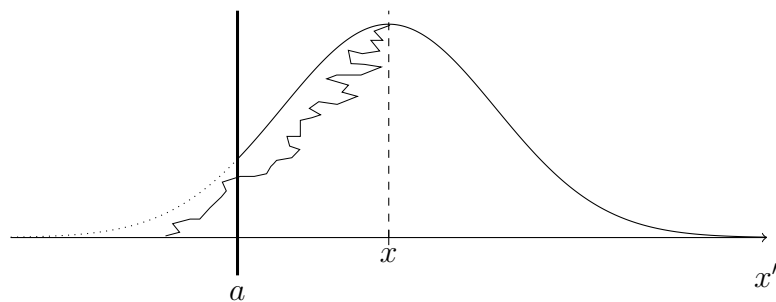
$$G_\infty(x, t | x', t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) \mathcal{H}(t > t') \quad (\text{B.2})$$



- Maintenant, il nous suffit de "retirer" les particules qui sont passées au moins une fois par la frontière entre l'instant t et t' . D'après le théorème des valeurs intermédiaires (les trajectoires browniennes sont continues), les particules se trouvant à gauche de la frontière à l'instant t' , sont passées au moins une fois par la frontière. Nous pouvons donc les retirer :

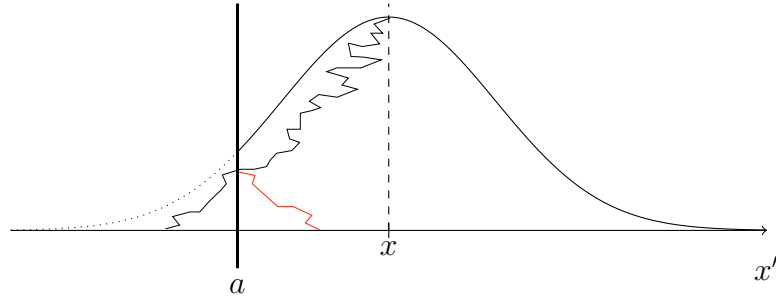


- Les particules restantes sont encore trop nombreuses : certaines des particules se trouvant dans le milieu semi-infini $[a, +\infty[$ à l'instant t' sont passées par la frontière durant $[t', t]$:



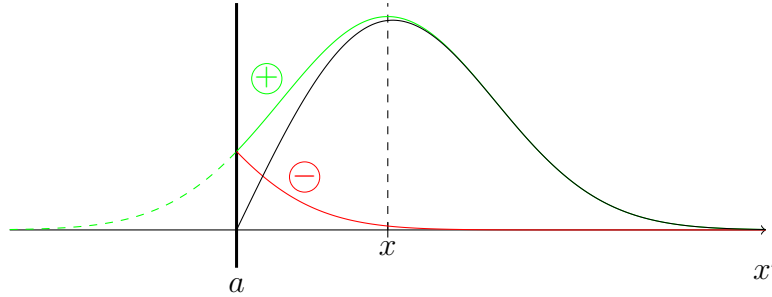
- Pour trouver la densité de ces particules, il suffit d'utiliser le fait que la propagation des particules est diffusive (isotrope). Ainsi, à tout instant, la probabilité qu'une particule se déplace vers la gauche est égale à la probabilité qu'elle se déplace vers la droite. On en déduit la relation suivante :

"la densité des particules en $x \in [a, +\infty[$ à l'instant t qui sont passées au moins une fois par la frontière " est égal à "la densité des particules en $(2a - x) \in] - \infty, a]$ à l'instant t qui sont passées au moins une fois par la frontière".



Cette idée, nous permet d'en déduire la densité de répartition des particules en milieu semi-infini.

$$G(x, t|x', t') = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) - \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'}} \exp\left(-\frac{(2a-x-x')^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) \right) \mathcal{H}(x > a, t > t') \quad (\text{B.3})$$



Temps de premier passage, Milieu-Semi-Infini

Pour déterminer le temps de premier passage à la frontière (en $x = a$), nous utilisons le flux Φ_a en $x = a$. En notant \vec{j} le vecteur densité surfacique de flux, on sait que :

$$\Phi_{\partial\Omega}(t') = \int_{\partial\Omega} \vec{j}(x', t') \cdot \vec{n}(x') \, d\sigma(x') \quad (\text{B.4})$$

Ainsi :

$$\Phi_a(t') = \vec{j}(a, t') \cdot \vec{n}(a) \quad (\text{B.5})$$

La loi de Fourier nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \Phi_a(t') &= -D \vec{\nabla}_x \eta(a, t') \cdot \vec{n}(a) \\ \Phi_a(t') &= -D \partial_x \eta(a, t') \\ \Phi_a(t') &= -D \partial_x G(x, t|a, t') \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Rappelons que $-D \partial_x G(x, t|a, t')$ est interprété comme le flux surfacique en a de particules à l'instant t' , ces particules étant à l'origine distribuées suivant un Dirac en x à l'instant t .

De plus, si on intègre le flux sur \mathbb{R}_+ on a :

$$\int_{-\infty}^t \Phi_a(t') \, dt' = 1 \quad (\text{B.7})$$

puisque la condition initiale est un Dirac en x (chaque particule atteint la frontière en un temps fini, propriété du Mouvement Brownien). Par conséquent, la densité du temps de premier passage f_{tpp} vaut :

$$f_{tpp}(t') = \Phi_a(t') \quad (\text{B.8})$$

En utilisant l'équation (B.6), on en déduit l'expression du temps de premier passage :

$$f_{tpp}(t') = \sqrt{\frac{(x-a)^2}{4\pi D}} \frac{1}{(t-t')^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{4D(t-t')}\right) \quad (\text{B.9})$$

La fonction de répartition F_{tpp} vérifie

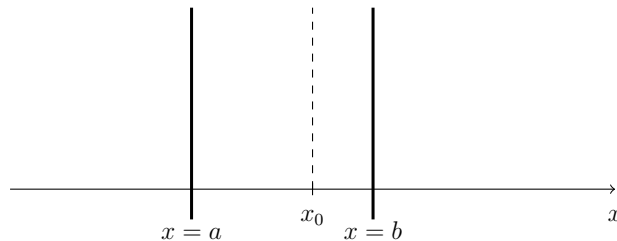
$$F_{tpp}(t') = 1 - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{(x-a)^2}{4D(t-t')}}\right) \quad (\text{B.10})$$

avec $F_{tpp}(t) = 0$ et $F_{tpp}(-\infty) = 1$.

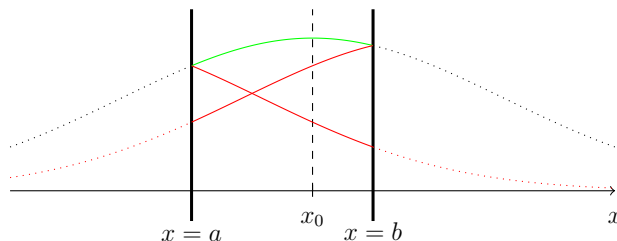
B.2 Milieu Segment $1D$

B.2.1 Construction de la densité

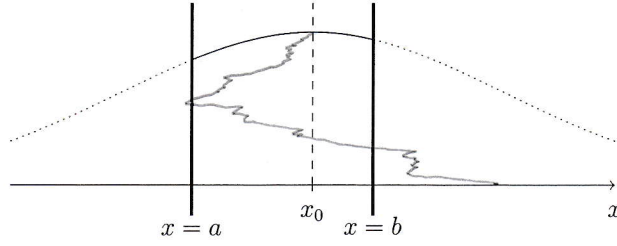
Notre objectif ici, est de trouver une expression de la densité des particules à l'instant t qui ne sont jamais sorties du segment $[a, b]$ sachant qu'elles étaient en $x_0 \in [a, b]$ à l'instant t_0 . Nous allons utiliser le même raisonnement que précédemment, et commencer par travailler en milieu infini. On sait qu'à l'instant $t' < t$, une particule en x_0 à l'instant initiale t est distribuée suivant une gaussienne de moyenne x_0 , d'écart type $\sigma_{t-t'} = \sqrt{2D(t-t')}$ (en milieu infini) :



Comme dans le cas semi-infini, nous pouvons enlever les particules qui sont passées au moins une fois par $x = a$ et au moins une fois par $x = b$:

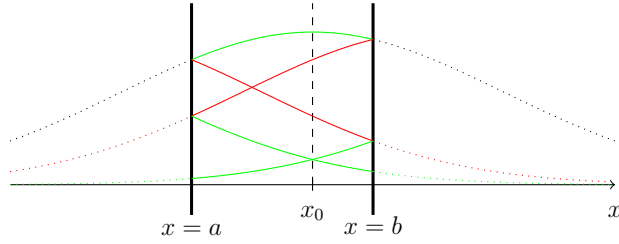


Contrairement au milieu semi-infini, nous venons d'enlever trop de particule. En effet, nous avons enlever deux fois la densité des particules qui sont passées au moins une fois en $x = a$ et se retrouvant à droite de $x = b$ à l'instant t' , comme l'illustre le schéma suivant :



Nous devons donc les rajouter.

Remarque : le même raisonnement s'applique aux particules qui sont passées au moins une fois par $x = b$ et se retrouvant à gauche de $x = a$ à l'instant t' .



Le même raisonnement que précédemment conduit au fait que nous venons de rajouter trop de particules. Nous devons donc les enlever, et ainsi de suite. En répétant le raisonnement à l'infini, on obtient la densité spatiale des particules dans le segment suivante :

$$G^{seg}(x_0, t|x', t') = \mathcal{H}(x_0 \in]a, b]) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\begin{array}{l} \exp\left(-\frac{(x_0 - x' - 2n(b-a))^2}{4D(t-t')}\right) \\ - \exp\left(-\frac{(x_0 + x' - 2a - 2n(b-a))^2}{4D(t-t')}\right) \end{array} \right) \quad (\text{B.11})$$

B.2.2 Densité de probabilité dans le segment

- Fonction de répartition du Temps de premier passage en Milieu Segment :

$$F_{tpp}^{seg}(t'; x_0, t, a, b) = 1 + \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{erf}\left(\frac{x_0 - b - 2n(b-a)}{\sqrt{4D(t-t')}}\right) \\ + \operatorname{erf}\left(\frac{x_0 + b - 2a - 2n(b-a)}{\sqrt{4D(t-t')}}\right) \\ - 2 \operatorname{erf}\left(\frac{x_0 - a - 2n(b-a)}{\sqrt{4D(t-t')}}\right) \end{array} \right\} \quad (\text{B.12})$$

avec $F_{tpp}^{seg}(t; x_0, t, a, b) = 0$ et $F_{tpp}^{seg}(-\infty; x_0, t, a, b) = 1$.

- Fonction de répartition de la position sachant que la particule n'est pas sortie durant

l'intervalle de temps $[t, t']$:

$$F_{ss}^{seg}(x', t'; x_0, t, a, b) = \frac{\int_a^{x'} G^{seg}(x_0, t|x', t')dx'}{1 - F_{tpp}^{seg}(t'; x_0, t, a, b)}$$

$$= \frac{\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \begin{array}{l} 2 \operatorname{erf} \left(\frac{x_0 - a - 2n(b-a)}{\sqrt{4D(t-t')}} \right) \\ - \operatorname{erf} \left(\frac{x_0 - x' - 2n(b-a)}{\sqrt{4D(t-t')}} \right) \\ - \operatorname{erf} \left(\frac{x_0 + x' - 2a - 2n(b-a)}{\sqrt{4D(t-t')}} \right) \end{array} \right\}}{1 - F_{tpp}^{seg}(t'; x_0, t, a, b)} \quad (\text{B.13})$$

- Calcul de la Probabilité de sortir à droite/gauche en utilisant la notion de flux :

— **Flux en $x = a$ à l'instant t' :**

$$Flux_a^{seg}(t'; x_0, t, a, b) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[\frac{x_0 - a - 2n(b-a)}{\sqrt{4\pi D(t-t')}} \frac{1}{(t-t')^{\frac{3}{2}}} \exp \left(-\frac{(x_0 - a - 2n(b-a))^2}{4D(t-t')} \right) \right] \quad (\text{B.14})$$

— **Flux en $x = b$ à l'instant t' :**

$$Flux_b^{seg}(t'; x_0, t, a, b) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{x_0 - b - 2n(b-a)}{\sqrt{4\pi D(t-t')}} \frac{1}{(t-t')^{\frac{3}{2}}} \exp \left(-\frac{(x_0 - b - 2n(b-a))^2}{4D(t-t')} \right) \right] \quad (\text{B.15})$$

Ainsi, on en déduit la probabilité $Prob_a^{seg}$ de sortir en a et la probabilité $Prob_b^{seg}$ de sortir en b à l'instant t' suivantes :

$$Prob_a^{seg}(t'; x_0, t, a, b) = \frac{Flux_a^{seg}(t'; x_0, t, a, b)}{Flux_a^{seg}(t'; x_0, t, a, b) + Flux_b^{seg}(t'; x_0, t, a, b)} \quad (\text{B.16})$$

$$Prob_b^{seg}(t'; x_0, t, a, b) = \frac{Flux_b^{seg}(t'; x_0, t, a, b)}{Flux_a^{seg}(t'; x_0, t, a, b) + Flux_b^{seg}(t'; x_0, t, a, b)}$$

Remarque : ces probabilité dépendent de la position initiale v , de la taille du segment $[a, b]$ et de la durée $t - t'$.

B.2.3 Preuve de l'algorithme

Domaine $[a, b] \times [c, d]$.

Point de départ $(x_0, y_0) \in [a, b] \times [c, d]$ à l'instant 0.

Temps d'observation t (ici on considère le sens direct du temps).

Position de sortie du segment (x_s, y_s) .

Formulation intégrale de [52, 53, 55] :

$$(x_s, y_s) = \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_0^{+\infty} p_{T_y}(\tau_y|y_0)d\tau_y$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\tau_x < t \text{ .AND. } \tau_x < \tau_y) \int_c^d p_Y(y|\tau_x, \tau_y, y_0)dy \left(\begin{array}{l} + p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right) \\ + \mathcal{H}(\tau_y < t \text{ .AND. } \tau_y < \tau_x) \int_a^b p_X(x|\tau_y, \tau_x, x_0)dx \left(\begin{array}{l} + p_c(\tau_y|y_0)(c, y) \\ + p_d(\tau_y|y_0)(d, y) \end{array} \right) \\ + \mathcal{H}(t < \tau_x \text{ .AND. } t < \tau_y) \int_a^b p_X(x|t, \tau_x, x_0)dx \int_c^d p_Y(y|t, \tau_y, y_0)dy (x, y) \end{array} \right\} \quad (\text{B.17})$$

où :

- $p_{T_x}(\tau_x|x_0)$ densité de probabilité du temps de premier passage suivant x partant de x_0 .
- $p_{T_y}(\tau_y|y_0)$ densité de probabilité du temps de premier passage suivant y partant de y_0 .
- $p_X(x|t, \tau_x, x_0)$ densité de probabilité des particules dans le segment $[a, b]$ à l'instant t , sachant qu'elles sortiront (pour la première fois) au temps τ_x .
- $p_Y(y|t, \tau_y, y_0)$ densité de probabilité des particules dans le segment $[c, d]$ à l'instant t , sachant qu'elles sortiront (pour la première fois) au temps τ_y .
- $p_a(t|x_0)$ probabilité de sortir en a à l'instant t .
- $p_b(t|x_0)$ probabilité de sortir en b à l'instant t .
- $p_c(t|y_0)$ probabilité de sortir en c à l'instant t .
- $p_d(t|y_0)$ probabilité de sortir en d à l'instant t .

On construit la densité de probabilité des particules dans le segment $[a, b]$ à l'instant t , sachant qu'elles ne sont pas sorties du segment durant $[0, t]$:

$$\tilde{p}_X(x|t, x_0) = \frac{\int_t^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x p_X(x|t, \tau_x, x_0)}{\int_t^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x} \quad (\text{B.18})$$

idem

$$\tilde{p}_Y(y|t, y_0) = \frac{\int_t^{+\infty} p_{T_y}(\tau_y|y_0)d\tau_y p_Y(y|t, \tau_y, y_0)}{\int_t^{+\infty} p_{T_y}(\tau_y|y_0)d\tau_y} \quad (\text{B.19})$$

Notre formulation intégrale :

$$(x_s, y_s) = \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_0^{+\infty} p_{T_y}(\tau_y|y_0)d\tau_y \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\tau_x < t \text{ .AND. } \tau_x < \tau_y) \int_c^d \tilde{p}_Y(y|\tau_x, y_0)dy \left(\begin{array}{l} p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right) \\ + \mathcal{H}(\tau_y < t \text{ .AND. } \tau_y < \tau_x) \int_a^b \tilde{p}_X(x|\tau_y, y_0)dx \left(\begin{array}{l} p_c(\tau_y|y_0)(c, y) \\ + p_d(\tau_y|y_0)(d, y) \end{array} \right) \\ + \mathcal{H}(t < \tau_x \text{ .AND. } t < \tau_y) \int_a^b \tilde{p}_X(x|t, x_0)dx \int_c^d \tilde{p}_Y(y|t, y_0)dy (x, y) \end{array} \right\} \quad (\text{B.20})$$

Montrons que les deux formulations intégrales sont égales, nous faisons la démonstration

pour le cas suivant ($\tau_x < t$.AND. $\tau_x < \tau_y$) :

$$\begin{aligned}
& \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau_y|y_0)d\tau_y \int_c^d \tilde{p}_Y(y|\tau_x, y_0)dy \left\{ \begin{array}{l} p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right\} \\
= & \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau_y|y_0)d\tau_y \int_c^d \frac{\int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau'_y|y_0)d\tau'_y p_Y(y|\tau_x, \tau'_y, y_0)}{\int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau''_y|x_0)d\tau''_y} dy \left\{ \begin{array}{l} p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right\} \\
= & \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_{\tau_x}^{+\infty} \cancel{p_{T_y}(\tau_y|y_0)}d\tau_y \int_c^d \frac{\int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau'_y|y_0)d\tau'_y p_Y(y|\tau_x, \tau'_y, y_0)}{\int_{\tau_x}^{+\infty} \cancel{p_{T_y}(\tau''_y|x_0)}d\tau''_y} dy \left\{ \begin{array}{l} p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right\} \\
= & \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_c^d \int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau'_y|y_0)d\tau'_y p_Y(y|\tau_x, \tau'_y, y_0)dy \left\{ \begin{array}{l} p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right\} \\
= & \int_0^{+\infty} p_{T_x}(\tau_x|x_0)d\tau_x \int_{\tau_x}^{+\infty} p_{T_y}(\tau'_y|y_0)d\tau'_y \int_c^d p_Y(y|\tau_x, \tau'_y, y_0)dy \left\{ \begin{array}{l} p_a(\tau_x|x_0)(a, y) \\ + p_b(\tau_x|x_0)(b, y) \end{array} \right\}
\end{aligned} \tag{B.21}$$

Même raisonnement pour ($\tau_y < t$.AND. $\tau_y < \tau_x$) et ($t < \tau_x$.AND. $t < \tau_y$).

Annexe C

Méthode des fonctions de Green : Exemples en thermique

Nous présentons dans cette section deux exemples de mise en oeuvre de la méthode des fonctions de Green. Pour chacun de ces exemples, nous proposons un algorithme de Monte-Carlo permettant d'évaluer la température.

C.1 Exemple 1 : Couplage Conducto-Convecto-Radiatif en milieu semi-infini

On s'intéresse à l'évolution de la température T dans un slab semi-infini à une dimension ($[a, +\infty[$), semi transparent, de masse volumique ρ , de capacité C et de conductivité thermique λ uniformes. Le slab est au contact d'un fluide, semi-transparent, de température T_F homogène en espace. Les modes de transfert de chaleur sont la conduction et le rayonnement dans le solide, la convection et le rayonnement dans le fluide. Le coefficient de transfert de chaleur convectif h_F et le coefficient de transfert de chaleur radiatif volumique linéarisé ζ sont supposés homogènes. La condition initiale dans le solide est notée t_I au temps t_I . Le modèle de transfert de chaleur est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C \partial_t T = -\lambda \partial_{x^2}^2 T + \zeta (T_R - T) \ , \quad x \in]a, +\infty[, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h_F (T - T_F) \ , \quad y = a, t \in [t_I, +\infty[\\ T = t_I \ , \quad x \in \bar{\Omega}_S, t = t_I \\ T_R(x, t) = \int_{\mathcal{D}_R} p_\Gamma(\gamma) d\gamma T(x_\gamma, t) \ , \quad x \in \mathbb{R}, t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (\text{C.1})$$

La fonction de Green G propageant une impulsion de type Dirac du point (x, t) au point (x', t') est solution de l'équation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t G = D \partial_{x^2}^2 G - \frac{\zeta}{\rho C} G + \delta(x - x') \delta(t - t') \ , \quad x \in]a, +\infty[, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\partial G}{\partial n} = h_F G \ , \quad x = a, t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (\text{C.2})$$

Pour calculer la fonction de Green G , on résout les deux équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t G_1 = -\frac{\zeta}{\rho C} G_1 + \delta(t - t') , \quad t \in [t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (\text{C.3a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t G_2 = D\partial_{x^2}^2 G_2 + \delta(x - x')\delta(t - t') , \quad x \in \overset{\circ}{\Omega}_S, t \in [t_I, +\infty[\\ -\lambda \frac{\partial G_2}{\partial n} = h_F G_2 , \quad x \in \partial\Omega_S, t \in]t_I, +\infty[\end{array} \right. \quad (\text{C.3b})$$

où G_1 vérifie l'Eq. (C.2) avec $\lambda \equiv 0$ et G_2 vérifie l'Eq. (C.2) avec $\zeta \equiv 0$, et on remarque que le produit $G_1 G_2$ est solution de l'Eq. (C.2). Ainsi, on en déduit l'égalité suivante :

$$G(x, t|x', t') = \underbrace{\exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}(t - t')\right)}_{G_1(t|t')} \underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'}} \left(\exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) - \exp\left(-\frac{(x+x'-2a)^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) \right) + \frac{h}{\lambda} \exp\left(\frac{h_F}{\lambda}(x+x'-2a) + \frac{Dh^2(t-t')}{\lambda^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+x'-2a}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'}} + \frac{h_F}{\lambda}\sqrt{D(t-t')}\right) \right)}_{G_2(x,t|x',t')} \quad (\text{C.4})$$

où $\sigma_u = \sqrt{2Du}$. En utilisant le résultat de l'Eq. (3.28) on obtient :

$$T(x, t) = \left(\begin{array}{l} G_1(t|t_I) \int_a^{+\infty} G_2(x, t|x', t_I) dx' t_I(x') \\ + \int_{t_I}^t -G_1(t|t') D\partial_x G_2(x, t|a, t') T_F(t') dt' \\ + \int_{t_I}^t G_1(t|t') dt' \int_a^{+\infty} G_2(x, t|x', t') dx' \frac{\zeta}{\rho C} T_R(x', t') \end{array} \right) \quad (\text{C.5})$$

Contrairement aux trois exemples précédents, il n'est pas trivial de traduire cette équation en algorithme de Monte-Carlo puisqu'aucune densité de probabilité évidente n'apparaît dans l'expression. Pour contourner cette difficulté, nous utilisons la vision en propagation de Green explicitée dans la section précédente : considérons une impulsion au point x à l'instant $t > t_I$, se déplaçant en reverse jusqu'à une condition aux limites. Alors, cette information à soit atteint la condition initiale, soit la condition fluide, soit la source radiative. Identifions les différentes densités de probabilité associées à chaque cas :

- La distribution spatiale dans le slab semi-infini à l'instant t' est donnée par la fonction de Green $x' \mapsto G_2(x, t|x', t')$. Par conséquent, la densité de probabilité spatiale de l'information à l'instant t' est :

$$f_X(x', t') = \frac{G_2(x, t|x', t')}{\int_a^{+\infty} G_2(x, t|z, t') dz}, \quad x' \in [a, +\infty[, t' \in]-\infty, t] \quad (\text{C.6})$$

- La densité de probabilité des temps de départ en rayonnement est :

$$f_R : t_R \mapsto G_1(t|t_R) = \frac{\zeta}{\rho C} \exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}(t - t_R)\right), \quad t_R \in]-\infty, t] \quad (\text{C.7})$$

- La densité de probabilité des temps d'absorption par le fluide est donnée par le flux d'information en a :

$$f_F : t_F \mapsto -D\partial_x G_2(x, t|a, t - t_F), \quad t_F \in] - \infty, t] \quad (\text{C.8})$$

Pour identifier quelles conditions aux limites l'information a atteint, il suffit alors d'échantillonner le temps $t - t_R$ de départ en rayonnement suivant f_R , le temps $t - t_F$ d'absorption par la fluide suivant f_F , puis de comparer les trois temps $t_I, t - t_R$ et $t - t_F$. Si l'information a atteint la condition initiale ou si elle est émise en rayonnement, alors il suffit d'échantillonner la position initiale ou de départ en rayonnement grâce à f_X . En utilisant cette vision en propagation, on peut construire la formulation intégrale suivante :

$$T(x, t) = \int_{-\infty}^t f_R(t_R) dt_R \int_{-\infty}^t f_F(t_F) dt_F \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > \min(t - t_R, t - t_F)) \int_a^{+\infty} f_X(x_I, t_I) dx_I [T_I(x_I)] \\ + \mathcal{H}(t - t_R > \min(t_I, t - t_F)) \int_a^{+\infty} f_X(x_R, t - t_R) dx_R [T_R(x_R, t - t_R)] \\ + \mathcal{H}(t - t_F > \min(t_I, t - t_R)) [T_F(t - t_F)] \end{array} \right) \quad (\text{C.9})$$

L'algorithme de Monte-Carlo issu de l'Eq. (C.9) est donné ci-dessous :

```

1  $x = x_0$ ;
2  $t = t_0$ ;
3 Échantillonner  $t_R$  suivant  $f_R$ ;
4 Échantillonner  $t_F$  suivant  $f_F$ ;
5 if  $t_I > \min(t - t_R, t - t_F)$  then
6   | Échantillonner  $x_I$  suivant  $f_X(\cdot, t_I)$ ;
7   |  $w = T_I(x_I)$ ;
8 else if  $t - t_R > \min(t_I, t - t_F)$  then
9   | Échantillonner  $x_R$  suivant  $f_X(\cdot, t - t_R)$ ;
10  |  $w = T_R(x_R, t - t_R)$ ;
11 else
12  |  $w = T_F(t - t_F)$ ;

```

Si T_R et/ou T_F ne sont pas connus, il suffit d'utiliser le principe de double randomisation (voir 2.1.4). La double randomisation nécessite que l'on soit capable d'élaborer une MMC évaluant une estimation de la grandeur en question, ici T_R et T_F . Les algorithmes de Monte-Carlo évaluant une estimation de T_R et de T_F sont donnés dans le manuscrit et dans l'Ex. 1 respectivement.

C.2 Exemple 2 : Couplage Conducto-Radiatif avec source en milieu infini homogène

On s'intéresse à l'évolution de la température T dans un solide infini de dimension n , de masse volumique ρ , de capacité C et de conductivité thermique λ homogènes. Une puissance volumique notée ϕ est présent dans le milieu. Les modes de transfert de chaleur sont la conduction et le rayonnement (linéarisé). Le coefficient de transfert de chaleur radiatif volumique linéarisé ζ est supposé homogène (non nul). La condition initiale dans le solide est notée T_I au temps t_I . Le modèle de transfert de chaleur est le suivant :

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T = -\operatorname{div}(-\lambda \vec{\nabla}_x T) + \zeta (T_R - T) + \phi, & (t, \vec{x}) \in [t_I, +\infty[\times \mathbb{R}^n \\ T(\vec{x}, t_I) = T_I(\vec{x}), & \vec{x} \in \mathbb{R}^n \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

La fonction de Green G de l'Eq. (C.10) est solution de l'équation suivante :

$$\partial_t G(\vec{x}, t | \vec{x}', t') = -\operatorname{div}(-D \vec{\nabla}_x G(\vec{x}, t | \vec{x}', t')) + \frac{\zeta}{\rho C} G(\vec{x}, t | \vec{x}', t') + \delta_{\vec{x}}(\vec{x}) \delta_{t'}(t) \quad (\text{C.11})$$

où $t \in]t_I, +\infty[$, $t' \in [t_I, +\infty[$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$, $\vec{x}' \in \mathbb{R}^n$ et $D = \frac{\lambda}{\rho C}$ est la diffusivité thermique. En utilisant la méthode de la transformée de Fourier, on obtient :

$$G(\vec{x}, t | \vec{x}', t') = \exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}(t - t')\right) \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'})^n} \exp\left(-\frac{\|\vec{x} - \vec{x}'\|^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right), \quad t > t', \vec{x} \in \mathbb{R}^n, \vec{x}' \in \mathbb{R}^n \quad (\text{C.12})$$

où $\sigma_u = \sqrt{2Du}$. En utilisant la propriété établie par l'Eq. (3.28), on obtient :

$$T(\vec{x}, t) = \left(\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}(t - t_I)\right) \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t_I})^n} \exp\left(-\frac{\|\vec{x} - \vec{x}'\|^2}{2\sigma_{t-t_I}^2}\right) d\vec{x}' T_I(\vec{x}') \\ & + \int_{t_I}^t \exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}(t - t')\right) dt' \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'})^n} \exp\left(-\frac{\|\vec{x} - \vec{x}'\|^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) d\vec{x}' \frac{\zeta}{\rho C} T_R(\vec{x}', t') \\ & + \int_{t_I}^t \exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}(t - t')\right) dt' \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_{t-t'})^n} \exp\left(-\frac{\|\vec{x} - \vec{x}'\|^2}{2\sigma_{t-t'}^2}\right) d\vec{x}' \frac{\phi(\vec{x}', t')}{\rho C} \end{aligned} \right) \quad (\text{C.13})$$

Il est alors possible d'exprimer la température T au point \vec{x} au temps t sous formulation intégrale (en utilisant un changement de variable $s = t - t'$) :

$$T(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(s) ds \left(\begin{aligned} & \mathcal{H}(t_I > t - s) \int_{\mathbb{R}^n} p_{\mathcal{N}(\vec{x}, \sigma_{t-t_I})}(\vec{x}') d\vec{x}' [T_I(\vec{x}')] \\ & + \mathcal{H}(t_I < t - s) \int_{\mathbb{R}^n} p_{\mathcal{N}(\vec{x}, \sigma_s)}(\vec{x}') d\vec{x}' [T_R(\vec{x}', t - s) + \frac{\phi(\vec{x}', t-s)}{\zeta}] \end{aligned} \right) \quad (\text{C.14})$$

où $p_{\mathcal{T}}(s) = \frac{\zeta}{\rho C} \exp\left(-\frac{\zeta}{\rho C}s\right)$ est la densité de probabilité d'une loi exponentielle de paramètre $\frac{\zeta}{\rho C}$ et $p_{\mathcal{N}(\vec{x}, \sigma)}$ est la densité de probabilité d'une variable aléatoire suivant une loi normale de moyenne \vec{x} et d'écart-type σ . La lecture statistique de l'Eq.(C.14) est la suivante :

- On échantillonne le temps s que va mettre l'information pour atteindre la source radiative.

- Ce temps est échantillonné suivant une loi exponentielle de paramètre $\zeta/(\rho C)$.
- Si $t - s < t_I$, alors on a atteint la condition initiale avant d'atteindre la source radiative. Dans ce cas on échantillonne la position \vec{x}' en utilisant le propagateur de la conduction en remontant le temps jusqu'à l'instant initiale t_I . On récupère comme poids la température initiale à la position \vec{x}' .
- Si $t - s > t_I$, alors on a atteint la source radiative avant d'atteindre la condition initiale. Dans ce cas on échantillonne la position \vec{x}' en utilisant le propagateur de la conduction en remontant le temps jusqu'à l'instant $t - s$. On récupère comme poids la température radiative à la position \vec{x}' et on lui ajoute la contribution ϕ/ζ à la position \vec{x}' à l'instant $t - s$ qui est du à la source volumique présente dans le milieu.

A partir de cette lecture statistique, on obtient l'algorithme de Monte-Carlo suivant :

```

1 sum = 0;
2 sum2 = 0;
3 foreach i in 1 :N do
4    $\vec{x} = \vec{x}_0$ ;
5    $t = t_0$ ;
6   while  $t > t_I$  do
7     Échantillonner  $s$  suivant une loi exponentielle de paramètre  $\frac{\zeta}{\rho C}$ ;
8      $t = t - s$ ;
9     if  $t < t_I$  then
10      Échantillonner  $\vec{x}'$  suivant  $\mathcal{N}(\vec{x}, \sigma)$  où  $\sigma = (2D(t - t_I))^{\frac{3}{2}}$ ;
11       $w = T_I(\vec{x}')$ ;
12     else
13      Échantillonner  $\vec{x}'$  suivant  $\mathcal{N}(\vec{x}, \sigma)$  où  $\sigma = (2Ds)^{\frac{3}{2}}$ ;
14      Échantillonner  $\vec{x}''$  suivant  $\Gamma(\vec{x}')$ ;
15       $\vec{x} = \vec{x}''$ ;
16       $w = w + \frac{\phi(\vec{x}', t-s)}{\zeta}$ ;
17     end
18   end
19    $sum = sum + w$ ;
20    $sum2 = sum2 + w^2$ ;
21 end
22  $result = \frac{sum}{N}$ ;
23  $sigma = \frac{1}{\sqrt{N}} \left( \frac{sum2}{N} - result^2 \right)$ ;

```

Si T_R n'est pas connu, il suffit d'utiliser le principe de double randomisation (voir 2.1.4). La double randomisation nécessite que l'on soit capable d'élaborer une MMC évaluant une estimation de la grandeur en question, ici T_R . L'algorithme de Monte-Carlo évaluant une estimation de T_R est similaire à celui utilisé dans le reste du manuscrit.

Annexe D

Linéarisation et rayonnement

Nous partons de l'équation de transfert radiatif stationnaire formulée en termes d'intensité spécifique monochromatique $I_\nu \equiv I_\nu(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}, t)$ à la position $\vec{\mathbf{x}}$, dans la direction $\vec{\mathbf{u}}$, à l'instant t et à la fréquence ν :

$$\vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\nabla} I_\nu = -k_a^\nu I_\nu + k_a^\nu I_\nu^{eq} - k_s^\nu I_\nu + k_s^\nu \int_{4\pi} p_{s,\nu}(\vec{\mathbf{u}}|\vec{\mathbf{u}}') I_\nu' du' \quad (\text{D.1})$$

où k_a^ν est le coefficient d'absorption, k_s^ν le coefficient de diffusion, $p_{s,\nu}$ l'unique fonction de phase de diffusion, $I_\nu' \equiv I_\nu(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}', t)$ et $I_\nu^{eq} \equiv I_\nu^{eq}(T(\vec{\mathbf{x}}, t))$ l'intensité spécifique d'équilibre à la température $T(\vec{\mathbf{x}}, t)$ du solide ou du fluide. Bien que le transfert radiatif soit stationnaire, I_ν dépend de t en raison de l'évolution de la température solide / fluide.

En supposant que pour tous les instants et positions, la température solide / fluide reste proche d'une température de référence T_{ref} , la dépendance à la température de l'intensité spécifique d'équilibre peut être linéarisée :

$$I_\nu^{eq}(T) \approx I_\nu^{eq}(T_{ref}) + \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref})(T - T_{ref}) \quad (\text{D.2})$$

En utilisant de la propriété d'équilibre et l'isotropie de l'intensité spécifique d'équilibre, on écrit,

$$0 = -k_a^\nu I_\nu^{eq} + k_a^\nu I_\nu^{eq} - k_s^\nu I_\nu^{eq} + k_s^\nu \int_{4\pi} p_{s,\nu}(\vec{\mathbf{u}}|\vec{\mathbf{u}}') I_\nu^{eq} du' \quad (\text{D.3})$$

et en introduisant la notation $\tilde{I}_\nu = I_\nu - I_\nu^{eq}(T_{ref})$ pour les perturbations, en soustrayant les équations (D.1) et (D.3) et en utilisant la linéarisation (D.2), cela nous conduit à l'équation de transfert radiatif linéarisée en fonction de la température :

$$\vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\nabla} \tilde{I}_\nu \approx -k_a^\nu \tilde{I}_\nu + k_a^\nu \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref})(T - T_{ref}) - k_s^\nu \tilde{I}_\nu + k_s^\nu \int_{4\pi} p_{s,\nu}(\vec{\mathbf{u}}|\vec{\mathbf{u}}') \tilde{I}_\nu' du' \quad (\text{D.4})$$

On fait le choix de réécrire cette équation en utilisant la température de radiance $T_{R,\vec{\mathbf{u}}}^\nu$ dans la direction $\vec{\mathbf{u}}$. Cette température de radiance est une grandeur spectrale et directionnelle définie comme la température pour laquelle l'intensité spécifique d'équilibre est égale à l'intensité spécifique :

$$I_\nu^{eq}(T_{R,\vec{\mathbf{u}}}^\nu(\vec{\mathbf{x}}, t)) = I_\nu(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}, t) \quad (\text{D.5})$$

En utilisant l'équation D.2,

$$I_\nu \approx I_\nu^{eq}(T_{ref}) + \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref})(T_{R,\vec{\mathbf{u}}}^\nu - T_{ref}) \quad (\text{D.6})$$

par conséquent,

$$\tilde{I}_\nu \approx \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref})(T_{R,\vec{u}}^\nu - T_{ref}) \quad (\text{D.7})$$

et l'équation D.4 devient

$$\boxed{\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T_{R,\vec{u}}^\nu \approx -k_a^\nu T_{R,\vec{u}}^\nu + k_a^\nu T - k_s^\nu T_{R,\vec{u}}^\nu + k_s^\nu \int_{4\pi} p_{s,\nu}(\vec{u}|\vec{u}') T_{R,\vec{u}'}^\nu du'} \quad (\text{D.8})$$

Dans l'équation de la chaleur pour un solide semi-transparent ou un fluide semi-transparent, la densité de puissance radiative ψ_R est défini comme la différence des densités de puissance absorbées et émises, $\psi_R = \psi_{absorbed} - \psi_{emitted}$ with

$$\psi_{absorbed} = \int_{4\pi} du \int_0^{+\infty} d\nu k_a^\nu I_\nu \quad (\text{D.9})$$

et

$$\psi_{emitted} = \int_{4\pi} du \int_0^{+\infty} d\nu k_a^\nu I_\nu^{eq} \quad (\text{D.10})$$

En termes de températures de radiance, y compris la linéarisation avec la température de l'intensité d'équilibre (en utilisant les D.2 et D.7) et via la loi de Stefan-Boltzmann $\int_0^{+\infty} I_\nu^{eq}(T_{ref}) d\nu = \frac{\sigma T_{ref}^4}{\pi}$, on écrit

$$\begin{aligned} \psi_R &= \int_{4\pi} du \int_0^{+\infty} d\nu k_a^\nu \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref})(T_{R,\vec{u}}^\nu - T) \\ &= \int_{4\pi} du \int_0^{+\infty} d\nu k_a^\nu \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref}) T_{R,\vec{u}}^\nu - \left[\int_{4\pi} du \int_0^{+\infty} d\nu k_a^\nu \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref}) \right] T \\ &= 16k_a \sigma T_{ref}^3 \left(\left[\int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du \int_0^{+\infty} p_N(\nu) T_{R,\vec{u}}^\nu \right] - T \right) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

où

$$p_N(\nu) = \frac{\pi \partial_T I_\nu^{eq}(T_{ref})}{4k_a^\nu \sigma T_{ref}^3} \quad (\text{D.12})$$

et

$$k_a = \int_0^{+\infty} p_N(\nu) d\nu k_a^\nu \quad (\text{D.13})$$

nous retenons finalement,

$$\boxed{\begin{cases} \psi_R = \zeta(T_R - T) \\ T_R = \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du \int_0^{+\infty} p_N(\nu) T_{R,\vec{u}}^\nu \end{cases}} \quad (\text{D.14})$$

avec $\zeta = 16k_a \sigma T_{ref}^3$ et

Annexe E

Impossibilité de gérer le non-linéaire avec la marche sur δ -sphere

Nous présentons les détails des calculs aboutissants à l'impasse présentée dans la sec. 4.2. Cette impasse est essentiellement due au modèle, qui est à l'origine de l'apparition de gradient dans la formulation intégrale de la température.

E.1 Approximation du modèle

Sachant qu'en géométrie confinée nous n'aurons pas accès au propagateur de la conduction, nous remplaçons le modèle Eq. (4.34) par un modèle approché. Ce modèle est obtenu en remplaçant l'opérateur laplacien par un taux d'accroissement :

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{T} = -\frac{2\lambda(\tilde{T})}{\delta^2 \rho C} \left(\tilde{T} - \left(\frac{1 + \frac{\lambda'(\tilde{T})(\tilde{T}^+ - \tilde{T}^-)}{2\lambda(\tilde{T})}}{2} \tilde{T}^+ + \frac{1 - \frac{\lambda'(\tilde{T})(\tilde{T}^+ - \tilde{T}^-)}{2\lambda(\tilde{T})}}{2} \tilde{T}^- \right) \right), & (t, x) \in [t_I, +\infty[\times \mathbb{R} \\ \tilde{T}(x, t_I) = T_I(x), & t = t_I, x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

où \tilde{T} est solution du modèle approché, $\tilde{T}^+ = \tilde{T}(x + \delta, t)$ et $\tilde{T}^- = \tilde{T}(x - \delta, t)$

E.2 Formulation intégrale

Nous exprimons la température \tilde{T} sous formulation intégrale :

$$\tilde{T}(x, t) = \int_0^{+\infty} \alpha(x, t-s) \exp\left(-\int_0^s \alpha(x, s-s') ds'\right) ds \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t-s) T_I(x) \\ + \mathcal{H}(t_I < t-s) \left(\begin{array}{l} \frac{1 + \frac{\lambda'(\tilde{T})(\tilde{T}^+ - \tilde{T}^-)}{2\lambda(\tilde{T})}}{2} \tilde{T}^+ \\ + \frac{1 - \frac{\lambda'(\tilde{T})(\tilde{T}^+ - \tilde{T}^-)}{2\lambda(\tilde{T})}}{2} \tilde{T}^- \end{array} \right) \end{array} \right)_{|(x, t-s)} \quad (\text{E.2})$$

où $\alpha(x, t) = \frac{2\lambda(\tilde{T}(x, t))}{\delta^2 \rho C}$. Puisque α dépend du temps, nous ne sommes pas capable d'échantillonner une réalisation de la variable aléatoire de densité de probabilité $s \mapsto \alpha(x, t -$

$s) \exp(-\int_0^s \alpha(x, s-s') ds')$. Nous utilisons ensuite la techniques des algorithmtes à collisions nulles (ACN, voir I) :

$$\tilde{T}(x, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(s) ds \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t-s) T_I(x) \\ + \mathcal{H}(t_I < t-s) \left(\begin{array}{c} p_+ \tilde{T}^+ \\ + p_- \tilde{T}^- \\ + (1-p_+ - p_-) \tilde{T} \end{array} \right)_{|(x, t-s)} \end{array} \right) \quad (\text{E.3})$$

où l'on choisi $\hat{\alpha} = \frac{2\hat{\lambda}}{\delta^2 \rho C}$ comme majorant de α , avec $\hat{\lambda}$ un majorant de λ , $p_{\mathcal{T}}$ est la densité de probabilité de la loi exponentielle de paramètre $\hat{\alpha}$ et p_{\pm} les deux probabilités $(2\lambda(\tilde{T}) \pm \lambda'(\tilde{T}) (\tilde{T}^+ - \tilde{T}^-)) / 4\hat{\lambda}$. Il est intéressant de remarquer qu'en choisissant δ assez petit on a bien $(\tilde{T}^+ - \tilde{T}^-)$ aussi petit qu'on le souhaite et donc $p_{\pm} \in [0, 1]$. Une fois la formulation intégrale établie, nous exprimons la température \tilde{T} comme l'espérance de la variable aléatoire Θ :

$$\tilde{T} = \mathbb{E}_{\Theta}(\Theta) \quad (\text{E.4})$$

où Θ est définie à partir de la lecture statistique de l'Eq. (E.3) :

$$\Theta(x, t) = \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{T}) T_I(x) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{T}) \left(\begin{array}{c} \mathcal{B}(p_+) \Theta^+ \\ + (1 - \mathcal{B}(p_+)) \mathcal{B}(p_+ + p_-) \Theta^- \\ + (1 - \mathcal{B}(p_+)) (1 - \mathcal{B}(p_+ + p_-)) \Theta \end{array} \right)_{(x, t - \mathcal{T})} \end{array} \right) \quad (\text{E.5})$$

où $\Theta^+ = \Theta(x + \delta)$ et $\Theta^- = \Theta(x - \delta)$, $\mathcal{T} \sim \mathcal{E}(\hat{\alpha})$ une variable aléatoire suivant une loi exponentielle de paramètre $\hat{\alpha}$, $\mathcal{B}(p)$ une variable aléatoire suivant une loi de Bernoulli de paramètre p .

E.3 Etude de l'algorithme de Monte-Carlo

L'algorithme de Monte-Carlo issu de la lecture statistique de la formulation intégrale Eq. (E.3), évaluant une estimation de la température \tilde{T} solution de l'Eq. (E.1) consiste à faire la moyenne d'un grand nombre de réalisation de la variable aléatoire Θ . La procédure d'échantillonnage de Θ est :

- Echantillonner un temps s suivant la loi de \mathcal{T} .
- Si $t_I > t - s$, alors on récupère comme poids de Monte-Carlo la température $T_I(x)$.
- Si $t_I < t - s$, alors :
 - Echantillonner une réalisation b_+ et b_- des variables aléatoires $\mathcal{B}(p_+)$ et $\mathcal{B}(p_+ + p_-)$
 - On récupère comme poids de Monte-Carlo la température $b_+ \Theta^+ + (1 - b_+) b_- \Theta^- + (1 - b_+) (1 - b_-) \Theta$ au point x au temps $t - s$.

Lors de cette procédure d'échantillonnage, nous avons identifié trois difficultés, dont une rendant l'algorithme de Monte-Carlo impraticable :

- La première difficulté vient du fait que les probabilités p_+ et p_- ne sont pas connues. Elles sont seulement définies comme des fonctions des températures \tilde{T}^+, \tilde{T}^- et \tilde{T} au point x au temps $t - s$, ces températures étant inconnues. Pour contourner cette difficulté, on remplace les températures par l'espérance de la variable aléatoire Θ : $p_{\pm} = (2\lambda(\mathbb{E}_{\Theta}(\Theta)) \pm \lambda'(\mathbb{E}_{\Theta}(\Theta))(\mathbb{E}_{\Theta^+}(\Theta^+) - \mathbb{E}_{\Theta^-}(\Theta^-))) / 4\hat{\lambda}$. De la même façon, on remplace les températures \tilde{T}^+, \tilde{T}^- et \tilde{T} par leurs espérances :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{T}(x, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(s) ds \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - s) T_I(x) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - s) \left(\begin{array}{l} p_+ \mathbb{E}_{\Theta^+}(\Theta^+) \\ + p_- \mathbb{E}_{\Theta^-}(\Theta^-) \\ + \underbrace{(1 - p_+ - p_-) \mathbb{E}_{\Theta}(\Theta)}_B \end{array} \right)_{|(x, t-s)} \end{array} \right) \\ p_{\pm} = \frac{2\lambda(\mathbb{E}_{\Theta}(\Theta)) \pm \lambda'(\mathbb{E}_{\Theta}(\Theta))(\mathbb{E}_{\Theta^+}(\Theta^+) - \mathbb{E}_{\Theta^-}(\Theta^-))}{4\hat{\lambda}} \end{array} \right. \quad (\text{E.6})$$

- En choisissant cette réécriture, nous sommes confronté à un nouveau problème bien connue des méthodes de Monte-Carlo : l'évaluation de l'espérance d'une fonction non-linéaire d'une espérance (4.1.2) : le terme B est exprimé comme une fonction non-linéaire de l'espérance des variables aléatoires Θ, Θ^+ et Θ^- . Une façon de contourner cette difficulté, est d'employer la stratégie proposée par J. Dauchet (sec. 4.1.2) qui consiste à utiliser un développement en série entière de la conductivité autour d'une température de référence. Mais pour des raisons pédagogiques, nous nous limitons dans un premier temps, à une conductivité linéaire en la température : $\lambda(T) = \lambda_{ref} + \beta(T - T_{ref})$ où λ_{ref} est la conductivité de référence, T_{ref} est la température de référence et β un paramètre pilotant l'importance de la non-linéarité. Avec ce choix de conductivité, on exprime la température sous forme d'une espérance :

$$\tilde{T}(x, t) = \mathbb{E}_{\vec{\mathcal{X}}} \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - \mathcal{T}) T_I(x) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - \mathcal{T}) \left(\begin{array}{l} P_+ \Theta_2^+ \\ + P_- \Theta_2^- \\ + (1 - P_+ - P_-) \Theta_2 \end{array} \right)_{(x, t-\mathcal{T})} \end{array} \right) \quad (\text{E.7})$$

où

- $\vec{\mathcal{X}} = (\mathcal{T}, \Theta_1, \Theta_1^+, \Theta_1^-, \Theta_2, \Theta_2^+, \Theta_2^-)$
- Θ_1 et Θ_2 sont des variables aléatoires i.i.d. par rapport à Θ ,
- $\mathcal{T} \sim \mathcal{E}(\hat{\alpha})$ une variable aléatoire suivant une loi exponentielle de paramètre $\hat{\alpha}$
- $P_{\pm} \equiv P_{\pm}(\Theta_1, \Theta_1^+, \Theta_1^-) = \left(2(\lambda_{ref} + \beta(\Theta_1 - T_{ref})) \pm \beta(\Theta_1^+ - \Theta_1^-) \right) / 4\hat{\lambda}$.
- La dernière difficulté rencontrée est plus problématique : les probabilités $p_+ = \mathbb{E}_{P_+}(P_+)$ et $p_- = \mathbb{E}_{P_-}(P_-)$ sont exprimées comme des espérances. La solution proposée par G. Terré (sec. 4.1.3) semble parfaitement adaptée à la situation. Mais malheureusement, cette stratégie est valable à condition que les réalisations des variables aléatoires P_+ et

P_- soient contenues dans l'intervalle $[0, 1]$ et ce n'est pas forcément le cas : En effet, selon le profil de la conductivité λ , et le profil de la condition initiale T_I , il n'y a aucune raison pour que les valeurs des réalisations θ_{\pm} des variables aléatoire Θ_1^{\pm} soient proches lorsque le pas de discrétisation δ tend vers zéro (ces réalisations sont à valeurs dans l'intervalle $[T_{min}, T_{max}]$). Ainsi, les variables aléatoires P_{\pm} sont bien d'espérance $p_{\pm} \in [0, 1]$, mais en revanche, leurs réalisations \mathbf{p}_{\pm} ne le sont pas forcément. Par conséquent, l'astuce proposée par G. Terrée n'est pas praticable et nous aboutissons à une impasse.

E.4 Conclusions et impossibilité

La difficulté majeure identifiée dans la conception de cet algorithme, vient du fait que les probabilités p_+ et p_- sont exprimées comme des espérances de variables aléatoires dont les réalisations \mathbf{p}_+ et \mathbf{p}_- ne sont pas forcément comprises entre 0 et 1. Elles ne peuvent donc pas être interprétées comme des probabilités. Ce problème est directement lié au gradient de la température qui est numériquement exprimé comme une différence de température. Il est intéressant à ce stade de donner une interprétation propagative de ce gradient :

Lorsque la conductivité est homogène Eq. (3.64), chaque déplacement est suivi d'un changement de direction isotrope, i.e. aucune direction n'est privilégiée. En revanche, lorsque la conductivité est hétérogène, l'information a tendance à "se propager de préférence" suivant le gradient spatial de la conductivité. En terme de propagation, l'information se dirige de préférence vers les conductivités élevées.

Cette interprétation propagative de l'information nous confirme que ce modèle Eq. (E.1), n'est pas adapté à la résolution d'un tel transfert thermique. En effet, ne sachant calculer qu'une température locale, nous n'avons pas accès au gradient de température, or d'après ce modèle, c'est le gradient qui pilote la propagation de l'information. Il devient nécessaire de changer de modèle, par exemple en considérant un modèle où le test de diffusion serait local.

Annexe F

Construction de la marche Méso

L'objectif de cette section est de montrer que l'ETR purement diffusive Eq. (F.1), est sous certaines hypothèses que l'on notera (H), une bonne approximation de l'équation de diffusion.

$$\partial_t f + c\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla f = -k_d f c + \int_{4\pi} k_d c f' p_S(\boldsymbol{\omega}'|\boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega}' \quad (\text{F.1})$$

F.1 Notations

Nous allons utiliser les deux variables descriptives suivantes :

- $\eta(\mathbf{x}, t) = \int_{4\pi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t) d\boldsymbol{\omega}$ la densité "d'énergie"
- $\mathbf{j}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t) = \int_{4\pi} c\boldsymbol{\omega} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t) d\boldsymbol{\omega}$ le vecteur densité surfacique de flux "d'énergie"

Remarque : nous faisons l'hypothèse que toutes les particules sont à vitesse constante c .

Il est intéressant de remarquer que l'Eq. (F.1) est une équation de transport sans source autre que celle de diffusion. Ainsi, sans faire le moindre calcul, il est trivial que η et \mathbf{j} vérifient l'équation de conservation suivante :

$$\partial_t \eta + \text{div}(\mathbf{j}) = 0 \quad (\text{F.2})$$

Remarque : Pour obtenir (F.2), il suffit de calculer $\int_{4\pi} (\text{F.1}) d\boldsymbol{\omega}$.

Pour la suite nous introduisons le paramètre d'asymétrie g suivant

$$g = \int_{4\pi} \langle \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}' \rangle p_S(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}$$

et calculons

$$\begin{aligned} & \int_{4\pi} c\boldsymbol{\omega} (\text{F.1}) d\boldsymbol{\omega} \\ \implies & \partial_t \mathbf{j} + \int_{4\pi} \langle c\boldsymbol{\omega}, \nabla f \rangle c\boldsymbol{\omega} d\boldsymbol{\omega} = -k_d c \mathbf{j} + k_d c g \mathbf{j} \\ \implies & \partial_t \mathbf{j} + \int_{4\pi} \langle c\boldsymbol{\omega}, \nabla f \rangle c\boldsymbol{\omega} d\boldsymbol{\omega} = -k_d c (1 - g) \mathbf{j} \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Ainsi, nous obtenons le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \eta + \operatorname{div}(\mathbf{j}) = 0 \\ \partial_t \mathbf{j} + \int_{4\pi} \langle c\boldsymbol{\omega}, \nabla f \rangle c\boldsymbol{\omega} \, d\boldsymbol{\omega} = -k_a c(1-g)\mathbf{j} \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

Malheureusement, ce système ne forme pas un système fermé pour les descripteur η et \mathbf{j} car la grandeur mésoscopique f apparaît dans la deuxième équation du système (F.4).

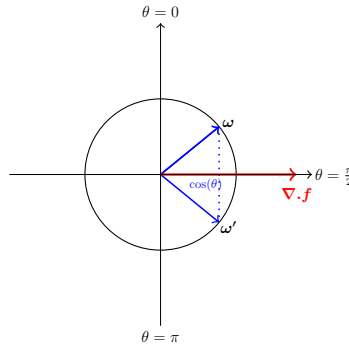
F.2 Approximation P1

Pour remédier à ce problème, nous utilisons l'**Approximation P1** qui consiste à faire l'hypothèse qu'à forte épaisseur optique f est proche de l'isotropie et que sa dépendance angulaire peut être représentée de façon approchée par les deux premiers termes de sa décomposition en harmoniques sphériques :

$$f \approx \frac{\eta}{4\pi} + \frac{3}{4\pi c} \eta \langle \mathbf{V}, \boldsymbol{\omega} \rangle \quad (\text{F.5})$$

où \mathbf{V} est la vitesse moyenne en \boldsymbol{x} . Ainsi on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} \langle c\boldsymbol{\omega}, \nabla f \rangle c\boldsymbol{\omega} \, d\boldsymbol{\omega} &= c^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) \, d\theta \langle \boldsymbol{\omega}_{\theta,\phi}, \nabla \frac{\eta}{4\pi} \rangle \boldsymbol{\omega}_{\theta,\phi} \\ &= c^2 2\pi \int_0^\pi \sin(\theta) \, d\theta \langle \boldsymbol{\omega}_{\theta,\phi}, \nabla \frac{\eta}{4\pi} \rangle \boldsymbol{\omega}_{\theta,\phi} \\ &= c^2 2\pi \int_0^\pi \sin(\theta) \, d\theta \cos(\theta) \left\| \nabla \frac{\eta}{4\pi} \right\| \boldsymbol{\omega}_{\theta,\phi} \\ &= c^2 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(\theta) \, d\theta \cos(\theta) \left\| \nabla \frac{\eta}{4\pi} \right\| 2\cos(\theta) \frac{\nabla \eta}{\|\nabla \eta\|} \\ &= c^2 4\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(\theta) \, d\theta \cos(\theta)^2 \nabla \frac{\eta}{4\pi} \\ &= \frac{c^2}{3} \nabla \eta \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$



Sous l'approximation P1 on retient donc :

$$\begin{cases} \partial_t \eta + \operatorname{div}(\mathbf{j}) = 0 \\ \partial_t \mathbf{j} + \frac{c^2}{3} \nabla \eta \approx -k_a c(1-g)\mathbf{j} \end{cases} \quad (\text{F.7})$$

avec k_a :

$$\begin{cases} \partial_t \eta + \operatorname{div}(\mathbf{j}) = -k_a c(\eta - \eta^0) \\ \partial_t \mathbf{j} + \frac{c^2}{3} \nabla \eta \approx -(k_a + k_d(1-g))c\mathbf{j} \end{cases} \quad (\text{F.8})$$

F.3 Approximation de diffusion

L'Approximation de diffusion consiste à négliger les variations temporelles de \mathbf{j} devant les autres termes, puis à reporter l'expression de \mathbf{j} dans la première équation, ce qui conduit à :

$$\partial_t \eta = -\operatorname{div} \left(-\frac{c}{3k_d(1-g)} \nabla \eta \right) \quad (\text{F.9})$$

avec k_a :

$$\partial_t \eta = -\operatorname{div} \left(-\frac{c}{3(k_a + k_d(1-g))} \nabla \eta \right) - k_a c (\eta - \eta^0) \quad (\text{F.10})$$

Remarque : au stationnaire il n'y a pas de différence entre l'approximation de diffusion et l'approximation P1.

F.4 Validité de l'approximation de diffusion

Pour discuter des conditions de validité de l'approximation de diffusion on considère un cas purement diffusif ($k_a = 0$) dans une géométrie monodimensionnelle. Le système (F.12) s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \eta + \partial_x j = 0 \\ \partial_t j + \frac{c^2}{3} \partial_x \eta = -k_d c (1-g) j \end{array} \right\} \quad (\text{F.11})$$

On note \tilde{j} et $\tilde{\eta}$ les transformées de Fourier de j et η soit $j(x) = \int_{\mathbb{R}} \tilde{j}(k) e^{ikx} dk$ et $\eta(x) = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\eta}(k) e^{ikx} dk$. Il vient alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \tilde{\eta} = -ik \tilde{j} \\ \partial_t \tilde{j} = -ik \frac{c^2}{3} \tilde{\eta} - k_d c (1-g) \tilde{j} \end{array} \right\} \quad (\text{F.12})$$

Ce qui se réécrit :

$$\frac{1}{k_d c^2 (1-g)} \partial_t^2 \tilde{\eta} + \frac{1}{c} \partial_t \tilde{\eta} + \frac{k^2}{3(1-g)k_d} \tilde{\eta} = 0 \quad (\text{F.13})$$

On en déduit les deux temps caractéristiques suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_+ = \frac{1}{\frac{k_{d,t}c}{2} \left(-1 + \sqrt{1 - \frac{4k^2}{3k_{d,t}^2}} \right)} \\ \tau_- = \frac{1}{\frac{k_{d,t}c}{2} \left(-1 - \sqrt{1 - \frac{4k^2}{3k_{d,t}^2}} \right)} \end{array} \right. \quad (\text{F.14})$$

où $k_{d,t} = (1-g)k_d$ représente l'inverse du libre parcours moyen de transport.

Dans les cas où l'on s'intéresse à des extensions caractéristiques grandes devant le libre parcours moyen de transport (i.e $k/k_{d,t} \ll 1$), on peut écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_+ \approx \frac{3k_{d,t}}{k^2 c} \\ \tau_- \approx \frac{1}{k_{d,t} c} \end{array} \right. \quad (\text{F.15})$$

avec $\tau_+ \gg \tau_-$. Le premier temps caractéristique correspond au temps d'atténuation par diffusion d'une perturbation d'extension $1/k$. Le second correspond au temps nécessaire pour parcourir un libre parcours moyen de transport à la vitesse c .

Si l'on fait l'approximation de diffusion, qui consiste à éliminer le terme $\partial_t j$ dans (F.12), alors avec la même démarche on obtient un seul temps caractéristique qui vaut $\tau = \frac{3k_{d,t}}{k^2 c}$, qui est bien le temps d'atténuation par diffusion. L'approximation de diffusion revient donc à négliger les dynamiques temporelles associées au temps caractéristique τ_- . L'hypothèse de diffusion sera donc valable si les extensions caractéristiques sont grandes devant le libre parcours moyen de transport et que le temps d'observation soit grand devant τ_- : ce qui est toujours le cas en considérant un libre parcours moyen assez petit pour que le nombre de collisions soit suffisamment important.

Annexe G

Condition de bords : Milne

G.1 Construction théorique de la condition de Milnes

L'objectif est de construire une condition sur le bord du domaine pour la fonction de distribution f connaissant la condition de bord sur la densité η . Ces grandeurs, f et η , sont définies dans l'Annexe F.

Pour construire cette condition de bord sur f , on considère un problème dans un slab $[0, L] \times \mathbb{R}_y \times \mathbb{R}_z$ où l'on impose un profil de densité η linéaire suivant la direction \vec{e}_x :

$$\eta(\vec{x}) = ax + b \quad (\text{G.1})$$

En s'inspirant de l'approximation P1, on impose également la forme de la fonction de distribution :

$$f(\vec{x}, \vec{u}) = \frac{\eta(\vec{x})}{4\pi} - \frac{1/k}{4\pi} \langle \vec{u}, \vec{\nabla} \eta(\vec{x}) \rangle \quad (\text{G.2})$$

Rappel : On sait que le vecteur densité surfacique de flux \vec{j} vérifie $\vec{j}(\vec{x}) = \int_{4\pi} \vec{u} f(\vec{x}, \vec{u}) du$. Alors, $\vec{j}(\vec{x}) = \eta(\vec{x}) \vec{V}_{\text{moy}}(\vec{x})$, puis en utilisant la loi de Fourier, on a :

$$-D \vec{\nabla} \eta = \eta(\vec{x}) \vec{V}_{\text{moy}}$$

Ensuite, selon l'hypothèse de l'approximation P1, Eq. (F.5), il est clair que l'on retrouve une équation de la même forme que l'Eq.(G.2). C'est la raison pour laquelle on a choisi ce profil pour f .

En utilisant l'Eq.(G.2), il est facile de montrer que la densité η vérifie :

$$\eta(\vec{x}) = \int_{4\pi} f(\vec{x}, \vec{u}) du \quad (\text{G.3})$$

et que la fonction de distribution f obéit à l'équation de transport suivante :

$$\langle \vec{u}, \vec{\nabla} f \rangle = -kf + \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' k f' \quad (\text{G.4})$$

Comme f est solution de l'équation de transport Eq.(G.4), on en déduit que :

$$f(\vec{x}, \vec{u}) = \int_0^{+\infty} ke^{-kl'} dl' \left[\begin{array}{l} \mathcal{H}(\vec{x}' \notin \Omega) f_{\partial\Omega}(\vec{y}) \\ + \mathcal{H}(\vec{x}' \in \Omega) \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' f(\vec{x}', \vec{u}') \end{array} \right] \quad (\text{G.5})$$

où $\vec{y} = \vec{x} - l_{\partial\Omega}\vec{u}$ avec $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) = \min \left\{ \|\vec{x} - \vec{y}'\| ; \vec{y}' \in \text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) \cap \partial\Omega \right\}$ et $\text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) = \left\{ \vec{x} - s\vec{u} ; s \in \mathbb{R}_+^* \right\}$.

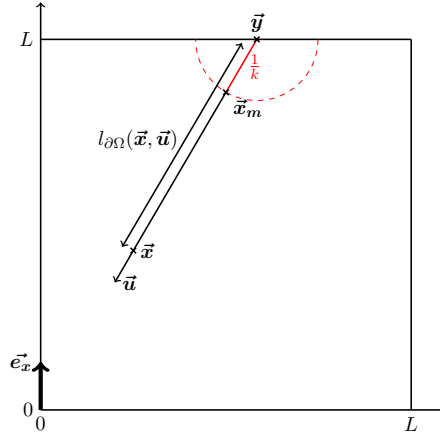
Pour l'instant la condition de bord sur la fonction de distribution $f_{\partial\Omega}$ n'est pas connue. En effet, nous connaissons seulement la condition de bord sur la densité $\eta_{\partial\Omega}$. L'idée est alors d'utiliser l'Eq.(G.2), et remplacer η par son expression :

$$\begin{aligned} f(\vec{x}, \vec{u}) &= \frac{ax+b}{4\pi} - \frac{1/k}{4\pi} a \langle \vec{u}; \vec{e}_x \rangle \\ &= \frac{1}{4\pi} \left(a \left(\vec{x} - \frac{1}{k} \langle \vec{u}; \vec{e}_x \rangle \right) + b \right) \\ &= \frac{1}{4\pi} \eta \left(\vec{x} - \frac{1}{k} \langle \vec{u}; \vec{e}_x \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{G.6})$$

En choisissant $\vec{y} \in \partial\Omega$, on a :

$$\boxed{\eta_{\partial\Omega}(\vec{y}) = 4\pi f \left(\vec{y} + \frac{\langle \vec{u}, \vec{e}_x \rangle}{k}, \vec{u} \right)} \quad (\text{G.7})$$

Nous en déduisons, à partir d'une condition de bord sur la densité η la valeur de la fonction de distribution f sur l'hémisphère entrant dans le domaine de rayon le libre parcours moyen $1/k$.



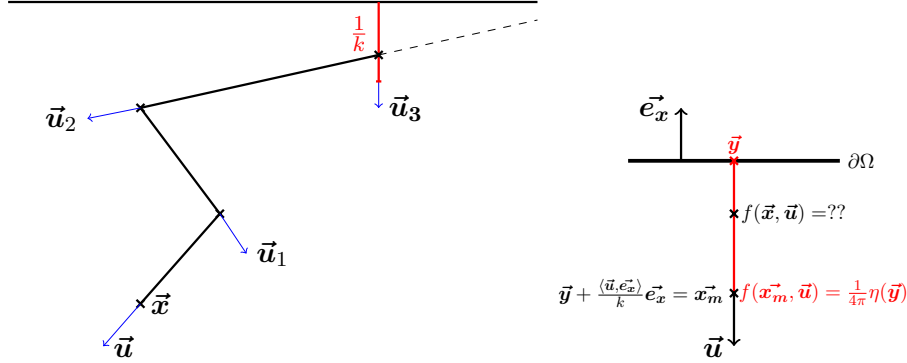
Ainsi, d'après (G.3), (G.5) et (G.7), on en déduit que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta(\vec{x}) = \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du \, 4\pi f(\vec{x}, \vec{u}) \\ f(\vec{x}, \vec{u}) = \int_0^{+\infty} k e^{-kl'} dl' \left(\begin{array}{l} \mathcal{H} \left(l' > l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - \frac{1}{k} \right) f(\vec{x}_m, \vec{u}) \\ + \mathcal{H} \left(l' > l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - \frac{1}{k} \right) \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' f(\vec{x}', \vec{u}') \end{array} \right) \\ \eta_{\partial\Omega}(\vec{y}) = 4\pi f(\vec{x}_m, \vec{u}) \end{array} \right. \quad (\text{G.8})$$

où $\vec{x}_m = \vec{y} + \frac{\langle \vec{u}, \vec{e}_x \rangle}{k} \vec{u}$, $\vec{y} = \vec{x} - l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u})\vec{u}$ et $\vec{x}' = \vec{x} - l'\vec{u}$.

G.2 Première impasse

Il est possible que le simple fait de changer de direction nous face rencontrer la condition de Milne [90] ce qui entraine une erreur si l'on remplace directement $4\pi f$ par la densité de bord $\eta_{\partial\Omega}$. En voici une illustration :



Pour contourner ce problème, on va chercher à répondre à la question suivante : Comment évaluer $f(\vec{x}, \vec{u})$ sachant que l'on connaît $f(\vec{x}_m, \vec{u})$?

On a $\vec{x}_m = \vec{y} + \frac{1}{k} \langle \vec{u}, \vec{e}_x \rangle \vec{e}_x$ et on pose $l = \|\vec{x}_m - \vec{x}\|$. D'après l'Eq.(G.7), on sait que :

$$f(\vec{x}_m, \vec{u}) = \frac{1}{4\pi} \eta_{\partial\Omega}(\vec{y})$$

Comme f est solution de l'ETR, on en déduit que :

$$\begin{aligned} f(\vec{x}_m, \vec{u}) &= e^{-kl} f(\vec{x}, \vec{u}) + (1 - e^{-kl}) \int_0^l \frac{ke^{-kl'}}{1 - e^{-kl'}} dl' \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' f(\vec{x}_m', \vec{u}') \\ \Rightarrow f(\vec{x}, \vec{u}) &= e^{kl} f(\vec{x}_m, \vec{u}) + (1 - e^{kl}) \int_0^l \frac{ke^{-kl'}}{1 - e^{-kl'}} dl' \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' f(\vec{x}_m', \vec{u}') \\ \Rightarrow f(\vec{x}, \vec{u}) &= e^{-kl} [e^{2kl} f(\vec{x}_m, \vec{u})] + (1 - e^{-kl}) \int_0^l \frac{ke^{-kl'}}{1 - e^{-kl'}} dl' \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' [-e^{kl} f(\vec{x}_m', \vec{u}')] \\ \Rightarrow f(\vec{x}, \vec{u}) &= e^{-kl} [e^{2kl} \frac{1}{4\pi} \eta_{\partial\Omega}(\vec{y})] + (1 - e^{-kl}) \int_0^l \frac{ke^{-kl'}}{1 - e^{-kl'}} dl' \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' [-e^{kl} f(\vec{x}_m', \vec{u}')] \end{aligned} \quad (G.9)$$

où $\vec{x}_m' = \vec{x}_m - l' \vec{u}$

On en déduit la formulation intégrale pour η suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta(\vec{x}) = \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du 4\pi f(\vec{x}, \vec{u}) \\ f(\vec{x}, \vec{u}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) < \frac{1}{k}) A \\ + \mathcal{H}(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) > \frac{1}{k}) B \end{array} \right\} \\ A = e^{-kl} [e^{2kl} \frac{1}{4\pi} \eta_{\partial\Omega}(\vec{y})] + (1 - e^{-kl}) \int_0^l \frac{ke^{-kl'}}{1 - e^{-kl'}} dl' [-e^{kl} \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' f(\vec{x}_m', \vec{u}')] \\ B = \int_0^{+\infty} ke^{-kl'} dl' \left[\begin{array}{l} \mathcal{H}(l' > l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - \frac{1}{k}) f(\vec{x}_m, \vec{u}) \\ + \mathcal{H}(l' < l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - \frac{1}{k}) \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du' f(\vec{x}', \vec{u}') \end{array} \right] \\ \eta_{\partial\Omega}(\vec{y}) = 4\pi f(\vec{x}_m, \vec{u}) \end{array} \right. \quad (G.10)$$

où :

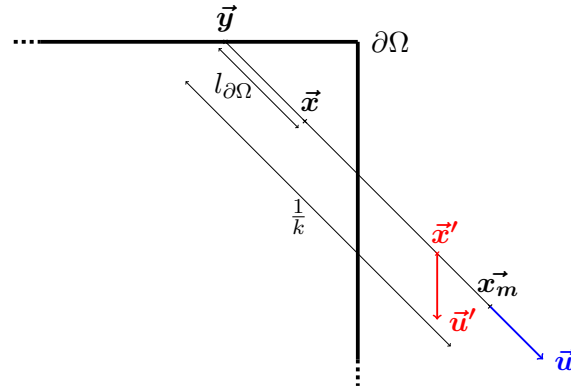
- $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) = \min \left\{ \|\vec{x} - \vec{y}'\| ; \vec{y}' \in \text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) \cap \partial\Omega \right\}$ avec $\text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) = \left\{ \vec{x} - s\vec{u} ; s \in \mathbb{R}_+^* \right\}$
- $l = \|\vec{x}_m - \vec{x}\|$
- $\vec{y} = \vec{x} - l_{\partial\Omega}\vec{u}$
- $\vec{x}' = \vec{x} + (l - l')\vec{u} = \vec{x}_m - l'\vec{u}$
- $\vec{x}_m = \vec{y} + \frac{\langle \vec{u}, e_{\vec{x}} \rangle}{k}$
- $\vec{x}'_m = \vec{x}_m - l'\vec{u}$

En utilisant la similitude (4.37) entre la densité de particule η et la température T , on en déduit une formulation intégrale pour la température T en milieu confiné au stationnaire :

$$\left\{ \begin{array}{l} T(\vec{x}) = \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} du \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}\left(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) < \frac{1}{k}\right) A \\ + \mathcal{H}\left(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) > \frac{1}{k}\right) B \end{array} \right\} \\ A = e^{-kl} \left[e^{2kl} T_{\partial\Omega}(\vec{y}) \right] + (1 - e^{-kl}) \int_0^l \frac{ke^{-kl'}}{1 - e^{-kl'}} dl' \left[-e^{kl} T(\vec{x}'_m) \right] \\ B = \int_0^{+\infty} ke^{-kl'} dl' \left[\begin{array}{l} \mathcal{H}\left(l' > l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - \frac{1}{k}\right) T_{\partial\Omega}(\vec{y}) \\ + \mathcal{H}\left(l' < l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - \frac{1}{k}\right) T(\vec{x}') \end{array} \right] \end{array} \right. \quad (\text{G.11})$$

G.3 Deuxième impasse

Étant donné une position \vec{x} et une direction \vec{u} , il est possible que $\vec{x}_m = \vec{y} - l_{\partial\Omega}\vec{u}$ soit situé en dehors du domaine Ω . Voici un exemple :



Pour contourner cette difficulté, l'idée est la suivante : nous travaillons directement avec la formulation intégrale Eq. (G.11) et nous choisissons des libres parcours moyen "assez petit" pour que ce type de situation soit très rare. Les algorithmes implémentés à partir de la lecture statistique de l'Eq. (G.11) retourne un message d'erreur si cette situation est détectée. Les résultats présentés dans ce manuscrit, n'ont retourné aucun message d'erreur.

Annexe H

Comparaison des marches Macro et Mésos pour la conduction

H.1 Introduction

Pour comparer le comportement des marches méso et macro, nous faisons le choix suivant :

Choix du libre parcours moyen δ_{me} en fonction du pas δ_{ma} de la marche macro de telle sorte que les nombres de collisions moyens des marches méso et macro soient identiques i.e. temps de calcul égaux entre les deux marches.

Plaçons nous en dimension n .

Marche Macro : Fixons un pas de discrétisation δ_{ma} , un temps d'observation t_{obs} . On sait que le temps pour parcourir un pas de longueur δ_{ma} suit une loi exponentielle de paramètre $2n\lambda/\delta_{ma}^2\rho\tilde{c}$. Ainsi le nombre de pas moyen $Nbr_Coll_{macro}^{t_{obs}}$ durant t_{obs} vérifie :

$$Nbr_Coll_{macro}^{t_{obs}} = \frac{t_{obs}2n\lambda}{\delta_{ma}^2\rho\tilde{c}}$$

Marche Meso : Fixons un libre parcours moyen δ_{me} , un temps d'observation t_{obs} . On sait que la longueur d'un pas suit une loi exponentielle de paramètre $1/\delta_{me} = \hat{k}_d$. La vitesse des particules c est constante et vérifie $c = n\lambda/\delta_{me}\rho\tilde{c}$. Ainsi le nombre de pas moyen $Nbr_Coll_{meso}^{t_{obs}}$ durant t_{obs} vérifie :

$$Nbr_Coll_{meso}^{t_{obs}} = \frac{t_{obs}n\lambda}{\delta_{me}^2\rho\tilde{c}}$$

Pour que le temps de calcul entre la marche macro et la marche méso soient similaires (proportionnel au nombre de collisions), nous devons imposer la condition suivante :

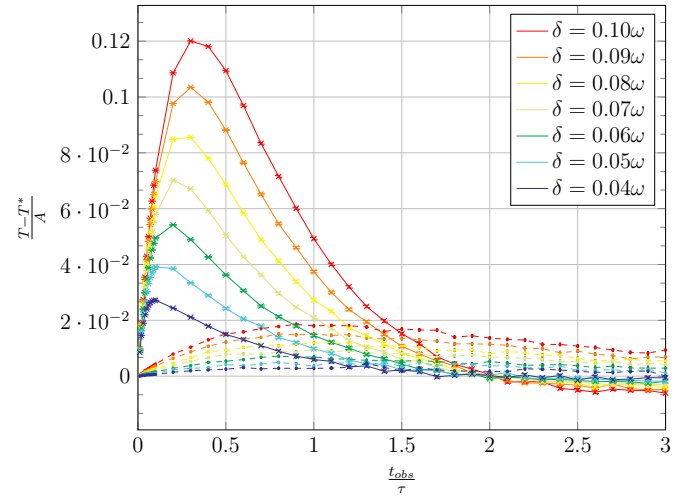
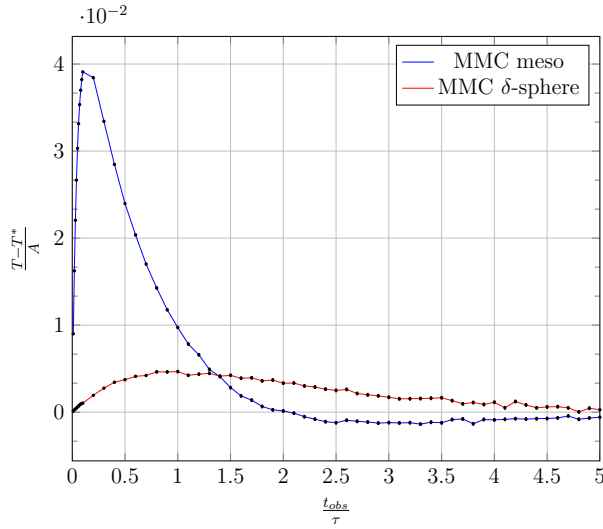
$$Nbr_Coll_{meso}^{t_{obs}} = Nbr_Coll_{macro}^{t_{obs}} \implies \delta_{me} = \frac{\delta_{ma}}{\sqrt{2}}$$

H.2 Instationnaire en milieu infini conductivité uniforme

H.2.1 Résultats instationnaire en milieu infini 2D

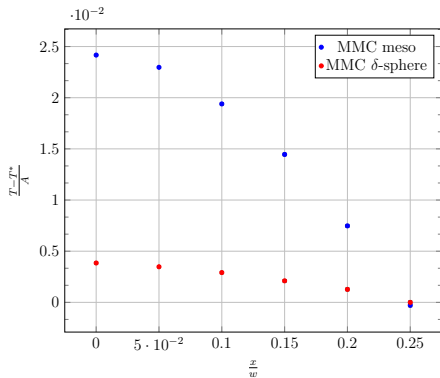
On considère le transfert de chaleur purement conductif, instationnaire, en milieu infini suivant :

$$\begin{cases} \rho C \partial_t T = -\text{div}(-\lambda \vec{\nabla} T) \\ T((x, y), 0) = \Theta_0 + \Delta \Theta_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{w}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{w}\right) \end{cases} \quad (\text{H.1})$$

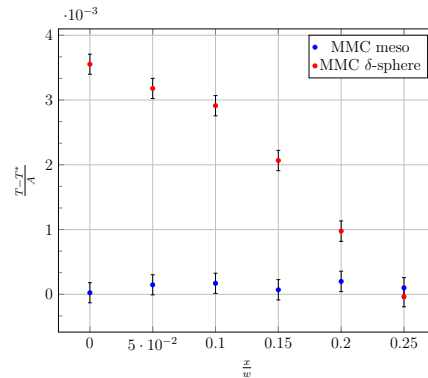


(a) Erreur relative $\frac{\Theta - \Theta^*}{\Delta \Theta_0}$ en fonction de $\frac{t_{obs}}{\tau}$ au sommet du sinus en $(0, 0)$. $\delta_{ma} = \delta$ et $\delta_{me} = \frac{\delta}{\sqrt{2}}$ avec $\delta = \frac{w}{20}$

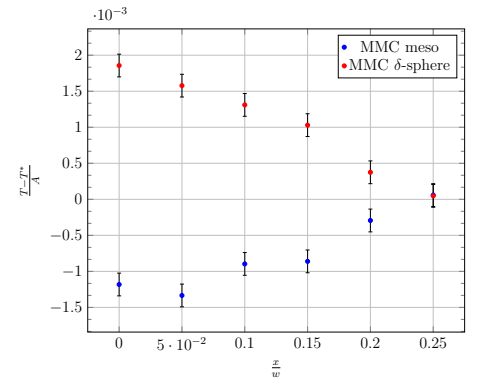
(b) Erreur relative $\frac{\Theta - \Theta^*}{\Delta \Theta_0}$ en fonction de $\frac{t_{obs}}{\tau}$ pour différent δ au sommet du sinus en $(0, 0)$ avec $\delta_{me} = \frac{\delta}{\sqrt{2}}$. Les courbes en trait plein correspondent à la marche méso, et celles en pointillés à la marche macro.



(c) $t_{obs} = 0.5\tau$, $\delta = \frac{w}{20}$



(d) $t_{obs} = 2\tau$, $\delta = \frac{w}{20}$



(e) $t_{obs} = 3\tau$, $\delta = \frac{w}{20}$

FIGURE H.1 – Comparaison des marches macro et méso en milieu infini, en instationnaire.

H.2.2 Explication du mauvais comportement du méso à temps court

Nous connaissons la solution du sinus en $2D$:

$$T^*(\vec{x}, t) = \cos(2\pi x)\cos(2\pi y)\exp(-8\pi^2 Dt) \quad (\text{H.2})$$

En utilisant un développement limité en 0, on obtient :

$$T^*(\vec{x}, t) \underset{t \rightarrow 0}{\simeq} \cos(2\pi x)\cos(2\pi y) (1 - 8\pi^2 Dt) \quad (\text{H.3})$$

Ainsi en $\vec{x} = (0, 0)$, on obtient :

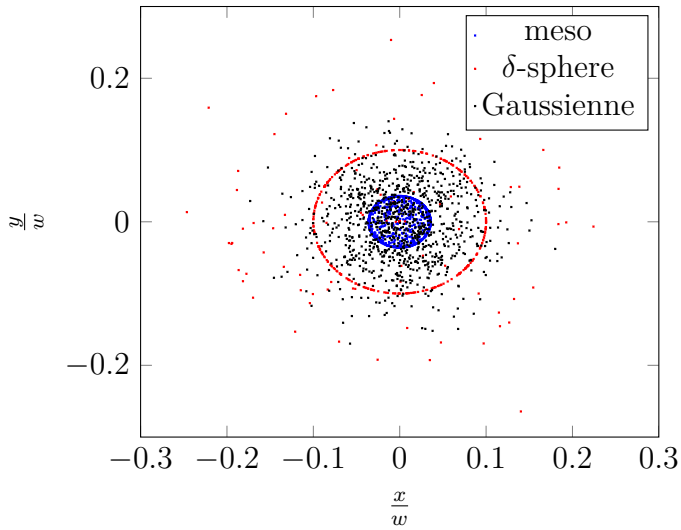
$$T^*(\vec{0}, t) \underset{t \rightarrow 0}{\simeq} 1 - 8\pi^2 Dt \quad (\text{H.4})$$

Concernant la marche méso, nous connaissons la vitesse des particules $c = 2D/\delta_{me}$. En choisissant un temps d'observation t assez court, il est possible de supposer que les particules n'auront pas le temps de changer de direction durant t . En utilisant un développement limité en 0 et en se plaçant en $\vec{0}$, on obtient :

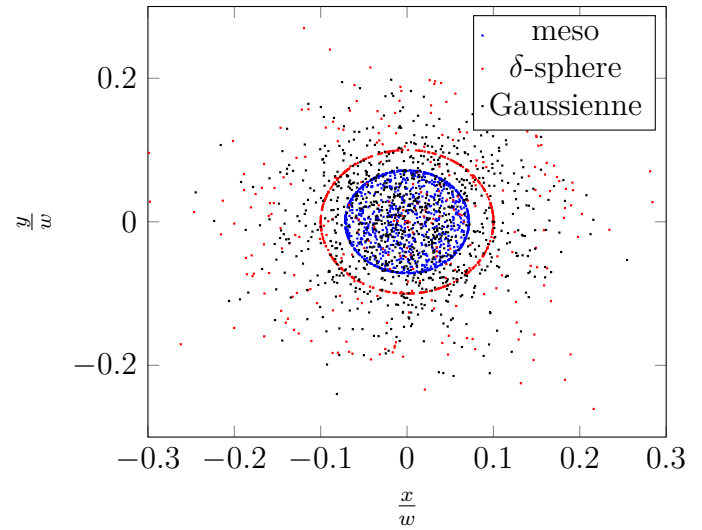
$$\begin{aligned} T_{me}(\vec{0}, t) &\underset{t \rightarrow 0}{=} \int_{2\pi} \frac{1}{2\pi} d\theta \cos\left(0 + \frac{2Dt}{\delta_{me}} \cos(\theta)\right) \cos\left(0 + \frac{2Dt}{\delta_{me}} \sin(\theta)\right) \\ &\underset{t \rightarrow 0}{\simeq} \int_{2\pi} \frac{1}{2\pi} d\theta \left(1 - \frac{\left(\frac{2Dt}{\delta_{me}} \cos(\theta)\right)^2}{2}\right) \left(1 - \frac{\left(\frac{2Dt}{\delta_{me}} \sin(\theta)\right)^2}{2}\right) \\ &\underset{t \rightarrow 0}{\simeq} \int_{2\pi} \frac{1}{2\pi} d\theta \left(1 - \frac{\left(\frac{2Dt}{\delta_{me}}\right)^2}{2} (\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2)\right) \\ &\underset{t \rightarrow 0}{\simeq} 1 - \frac{2D^2}{\delta_{me}^2} t^2 \end{aligned} \quad (\text{H.5})$$

De plus, pour que 70% des particules méso n'est pas diffusées (celles qui ont diffusées amplifient l'erreur car le calcul est réalisé en $\vec{0}$ i.e au sommet du sinus), il suffit de considérer $t = -\frac{\delta_{me}}{c} \ln(0.70) = -\frac{\delta_{me}^2}{2D} \ln(0.70)$. Ainsi en choisissant $\delta_{me} = \frac{0.05}{\sqrt{2}}$ et $D = 1$, on obtient $t = 2.229E^{-04}$. Donc :

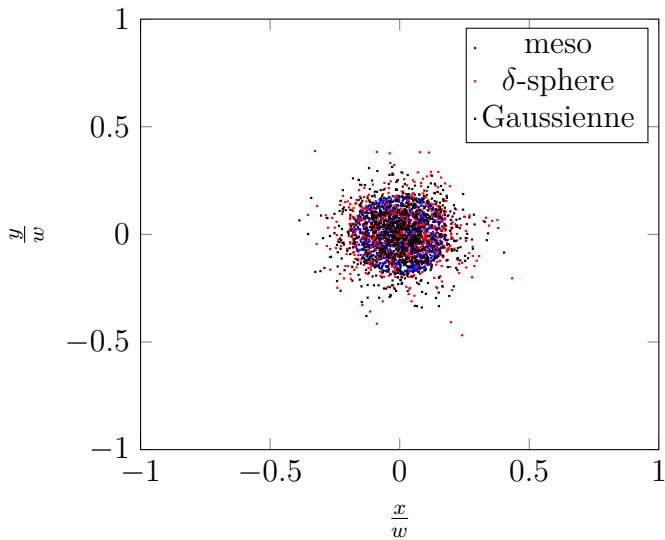
$$\begin{aligned} T^*(\vec{0}, t) &= 0.9824 \\ T_{me}(\vec{0}, t) &= 0.9999 \end{aligned} \quad (\text{H.6})$$



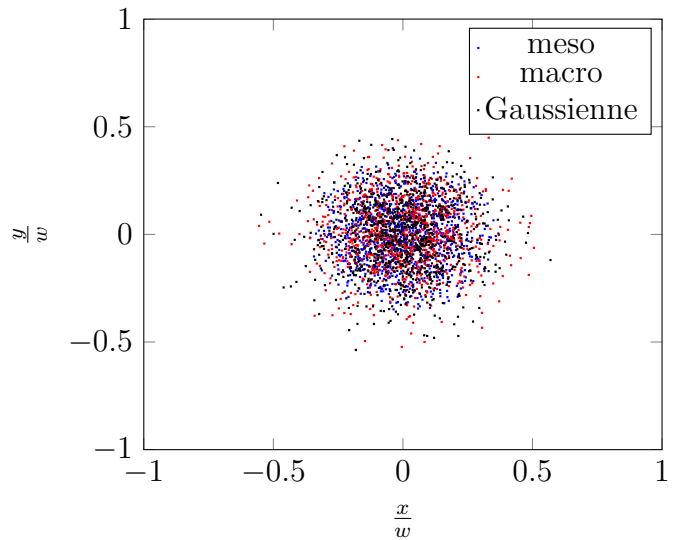
(a) $t_{obs} = 0.1\tau$



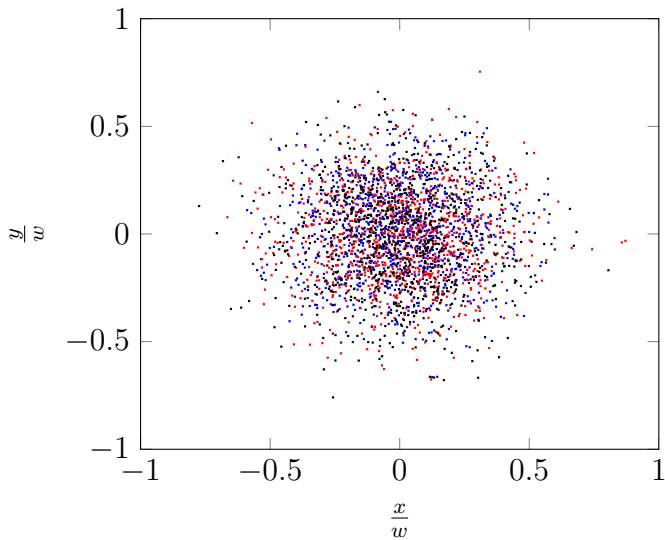
(b) $t_{obs} = 0.2\tau$



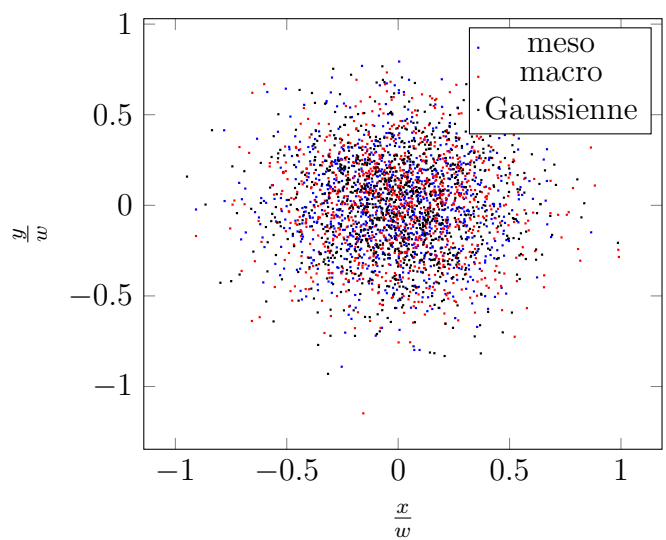
(c) $t_{obs} = 0.5\tau$



(d) $t_{obs} = 1\tau$



(e) $t_{obs} = 2\tau$



(f) $t_{obs} = 3\tau$

293
 FIGURE H.2 – Dispersion des marches méso (bleue), macro (rouge) et gaussienne (noir) pour plusieurs temps d'observation $t_{obs} = 0.1\tau, 0.2\tau, 0.5\tau, 1\tau, 2\tau$ et 3τ avec $\delta_{ma} = \delta$ et $\delta_{me} = \frac{\delta}{\sqrt{2}}$ avec $\delta = \frac{w}{20}$.

Remarques : Nous venons de montrer qu'à temps court (en fixant le libre parcours moyen), la marche méso est une mauvaise approximation de la diffusion ! Cela vient du fait que les particules n'ont pas le temps de suffisamment collisionner et par conséquent, l'approximation $P1$ n'est plus valide (transport pure à temps court).

Annexe I

Une preuve des Algorithmes à Collisions nulles

Soit X un variable aléatoire de loi exponentielle de paramètre k , avec k une fonction quelconque de l'espace. Soit X_{acn} la variable aléatoire issu de l'algorithme à collision nulle de paramètre $\hat{k} > k$. Pour montrer l'équivalence de ces deux variables aléatoires, nous allons montrer l'égalité de leurs fonctions de répartitions i.e. $F_X = F_{X_{acn}}$. Plus précisément, nous allons montrer que $\mathbb{P}(X_{acn} \geq l) = \mathbb{P}(X \geq l)$:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(X \geq l) &= \int_l^{+\infty} k(x') \exp\left(-\int_0^{x'} k(x) dx\right) dx' \\ &= \exp\left(-\int_0^l k(x) dx\right) \\ &= \exp(-\hat{k}l) \exp\left(\int_0^l \hat{k} - k(x) dx\right) \\ &= \exp(-\hat{k}l) \left[1 + \int_0^l \hat{k} - k(x) dx + \frac{1}{2!} \left(\int_0^l \hat{k} - k(x) dx\right)^2 + \dots\right]\end{aligned}\tag{I.1}$$

En utilisant la formulation intégrale de l'algorithme à collision nulle, on obtient :

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_{acn} \geq l) &= \exp(-\hat{k}l) \cdot 1 \\
&+ \int_0^l \hat{k} \exp(-\hat{k}x_0) dx_0 \left\{ \frac{k(x_0)}{\hat{k}} \cdot 0 + \left(1 - \frac{k(x_0)}{\hat{k}}\right) \left\{ \exp(-\hat{k}(l-x_0)) \cdot 1 \right. \right. \\
&+ \int_{x_0}^l \hat{k} \exp(-\hat{k}(x_1-x_0)) dx_1 \left\{ \frac{k(x_1)}{\hat{k}} \cdot 0 + \left(1 - \frac{k(x_1)}{\hat{k}}\right) \left\{ \exp(-\hat{k}(l-x_1)) \cdot 1 \right. \right. \\
&+ \dots \left. \left. \left. \left. \left. \right\} \right\} \right\} \right\} \\
&= \underbrace{\exp(-\hat{k}l)}_{\boxed{0}} \cdot 1 + \underbrace{\exp(-\hat{k}l) \int_0^l \hat{k} - k(x_0) dx_0}_{\boxed{1}} \\
&+ \underbrace{\exp(-\hat{k}l) \int_0^l \hat{k} - k(x_0) dx_0 \int_{x_0}^l \hat{k} - k(x_1) dx_1 + \dots}_{\boxed{2}} \\
&= \exp(-\hat{k}l) \left[1 + \int_0^l \hat{k} - k(x_0) dx_0 + \int_0^l \hat{k} - k(x_0) dx_0 \int_{x_0}^l \hat{k} - k(x_1) dx_1 + \dots \right] \tag{I.2}
\end{aligned}$$

$\boxed{0}$: probabilité de traverser la couche sans collision nulle.

$\boxed{1}$: probabilité de traverser la couche après une collision nulle.

$\boxed{2}$: probabilité de traverser la couche après deux collisions nulles.

Pour montrer l'égalité entre ces deux FDR, il suffit de vérifier l'égalité entre les équations (I.1) et (I.2), ce qui revient à montrer que :

$$\frac{1}{(n+1)!} \left(\int_0^l \hat{k} - k(x) dx \right)^{n+1} = \int_0^l \hat{k} - k(x_0) dx_0 \int_{x_0}^l \hat{k} - k(x_1) dx_1 \dots \int_{x_{n-1}}^l \hat{k} - k(x_n) dx_n \tag{I.3}$$

Pour des raisons pédagogiques, et dans le but de simplifier les notations, nous allons résoudre le problème suivant :

$$\forall f \in \mathcal{F}, \quad \frac{1}{n!} \left(\int_0^l f(x) dx \right)^{n+1} = \int_0^l f(x_0) dx_0 \int_{x_0}^l f(x_1) dx_1 \dots \int_{x_{n-1}}^l f(x_n) dx_n \tag{I.4}$$

où \mathcal{F} est l'ensemble des fonctions réelles à valeurs réelles.

Considérons la grandeur $I = \int_0^l f(x_0) dx_0 \int_{x_0}^l f(x_1) dx_1 \dots \int_{x_{n-1}}^l f(x_n) dx_n$, alors

$$I = \int_0^l f(x_0) dx_0 \int_{x_0}^l f(x_1) dx_1 \dots \int_{x_{n-1}}^l f(x_n) dx_n \mathbb{1}_{[x_0, l]}(x_1) \mathbb{1}_{[x_1, l]}(x_2) \dots \mathbb{1}_{[x_{n-1}, l]}(x_n) \tag{I.5}$$

où $\mathbb{1}_{[a, b]}$ est la fonction indicatrice prenant la valeur un sur le segment $[a, b]$ et la valeur zéro partout ailleurs. Comme tous les indices sont muets, on peut écrire

$$(n+1)!I = \sum_{\sigma \in S_{n+1}} I_\sigma \tag{I.6}$$

où $I_\sigma = \int_0^l f(x_{\sigma(0)})dx_{\sigma(0)} \dots \int_0^l f(x_{\sigma(n)})dx_{\sigma(n)} \mathbb{1}_{[x_{\sigma(0)}, l]}(x_{\sigma(1)}) \dots \mathbb{1}_{[x_{\sigma(n-1)}, l]}(x_{\sigma(n)})$, σ est une permutation et $(n+1)!$ est le cardinal du groupe symétrique S_{n+1} . On considère l'ensemble

$$D_\sigma = \left\{ x \in B_{n+1}(l, \|\cdot\|_\infty); 0 \leq x_{\sigma(0)} \leq x_{\sigma(1)} \leq \dots \leq x_{\sigma(n)} \leq l \right\} \quad (\text{I.7})$$

d'intérieur

$$\overset{\circ}{D}_\sigma = \left\{ x \in B_{n+1}(l, \|\cdot\|_\infty); 0 < x_{\sigma(0)} < x_{\sigma(1)} < \dots < x_{\sigma(n)} < l \right\} \quad (\text{I.8})$$

Montrons que $\forall \sigma, \sigma' \in S_{n+1}$ avec $\sigma \neq \sigma'$, on a $\overset{\circ}{D}_\sigma \cap \overset{\circ}{D}_{\sigma'} = \{\emptyset\}$. Nous allons montrer cette propriété par un raisonnement par l'absurde. Supposons qu'il existe $x \in \overset{\circ}{D}_\sigma \cap \overset{\circ}{D}_{\sigma'}$, alors par définition, on a

$$\begin{cases} 0 < x_{\sigma(0)} < x_{\sigma(1)} < \dots < x_{\sigma(n)} < l & (*) \\ 0 < x_{\sigma'(0)} < x_{\sigma'(1)} < \dots < x_{\sigma'(n)} < l & (**) \end{cases} \quad (\text{I.9})$$

Soit $i = \min \{j \in [0, n]; \sigma(j) \neq \sigma'(j)\}$ (i existe car $\sigma \neq \sigma'$), alors on a

$$\begin{aligned} (*) &\implies x_{\sigma(i)} < x_{\sigma'(i)} \\ (**) &\implies x_{\sigma'(i)} < x_{\sigma(i)} \end{aligned} \quad (\text{I.10})$$

ce qui est impossible. Ainsi, on vient de montré par l'absurde que $\overset{\circ}{D}_\sigma \cap \overset{\circ}{D}_{\sigma'} = \{\emptyset\}$. Ensuite il est trivial de remarquer que $\bigcup_{\sigma \in S_{n+1}} D_\sigma = B_{n+1}(l, \|\cdot\|_\infty)$, donc :

$$\begin{aligned} (n+1)!I &= \sum_{\sigma \in S_{n+1}} I_\sigma \\ &= \sum_{\sigma \in S_{n+1}} \int_0^l f(x_{\sigma(0)})dx_{\sigma(0)} \dots \int_0^l f(x_{\sigma(n)})dx_{\sigma(n)} \mathbb{1}_{[x_{\sigma(0)}, l]}(x_{\sigma(1)}) \dots \mathbb{1}_{[x_{\sigma(n-1)}, l]}(x_{\sigma(n)}) \\ &= \sum_{\sigma \in S_{n+1}} \int_0^l f(x_{\sigma(0)})dx_{\sigma(0)} \dots \int_0^l f(x_{\sigma(n)})dx_{\sigma(n)} \mathbb{1}_{D_\sigma}(x_{\sigma(0)}, \dots, x_{\sigma(n)}) \\ &= \int_0^l f(x_0)dx_0 \dots \int_0^l f(x_n)dx_n \mathbb{1}_{B_{n+1}(l, \|\cdot\|_\infty)}(x_0, \dots, x_n) \\ &= \int_0^l f(x_0)dx_0 \dots \int_0^l f(x_n)dx_n \\ &= \left(\int_0^l f(x)dx \right)^{n+1} \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

donc on obtient

$$I = \frac{1}{(n+1)!} \left(\int_0^l f(x)dx \right)^{n+1} \quad (\text{I.12})$$

on en déduit l'égalité entre les deux fonctions de répartition $F_X = F_{X_{acn}}$.

Annexe J

Linéarisation et MCP en rayonnement

Nous proposons un rapide rappel du principe et des conséquences de la linéarisation, puis nous présentons la mise en oeuvre de notre algorithme dans la configuration Cube.

J.1 Conséquence de la linéarisation T_L

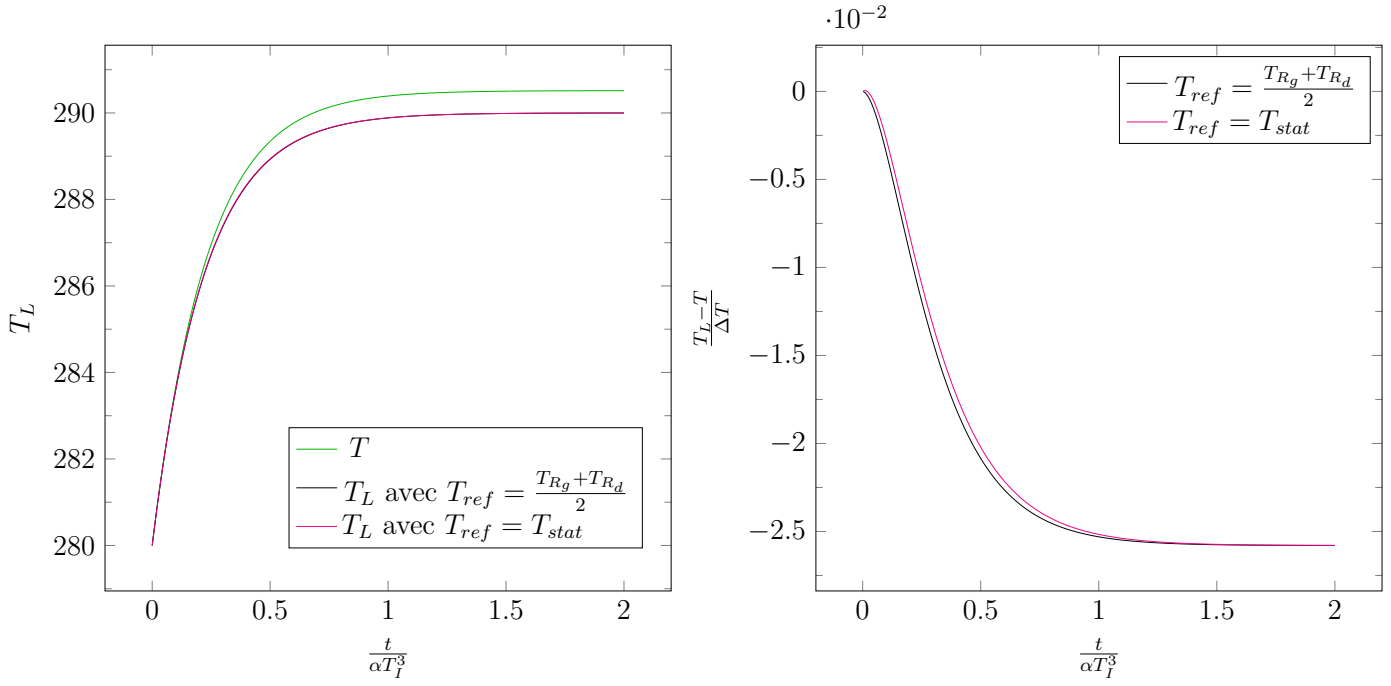
L'équation (5.11) est une équation différentielle ordinaire du premier ordre, non-linéaire en la température du fait qu'elle apparait à la puissance quatre dans le membre de droite. Comme expliqué dans la section 4.1.2, la résolution de telles équations différentielles non-linéaire par Monte-Carlo est compliquée du fait que $\mathbb{E}_X(X^2) \neq \mathbb{E}_X(X)^2$ entraînant une incapacité à exprimer la grandeur comme une unique espérance. Pour remédier à cette difficulté, la stratégie généralement adoptée consiste à considérer un modèle linéarisé comme une approximation de celui-ci. Ce modèle approché est obtenu en linéarisant l'équation autour d'une température de référence notée T_{ref} . En appliquant cette stratégie à l'Eq. (5.11), on obtient l'équation suivante,

$$\rho CV \frac{dT_L}{dt} = -16S\sigma T_{ref}^3 (T_L - \mathbb{E}_{\Theta_\Gamma}(\Theta_\Gamma)) \quad (\text{J.1})$$

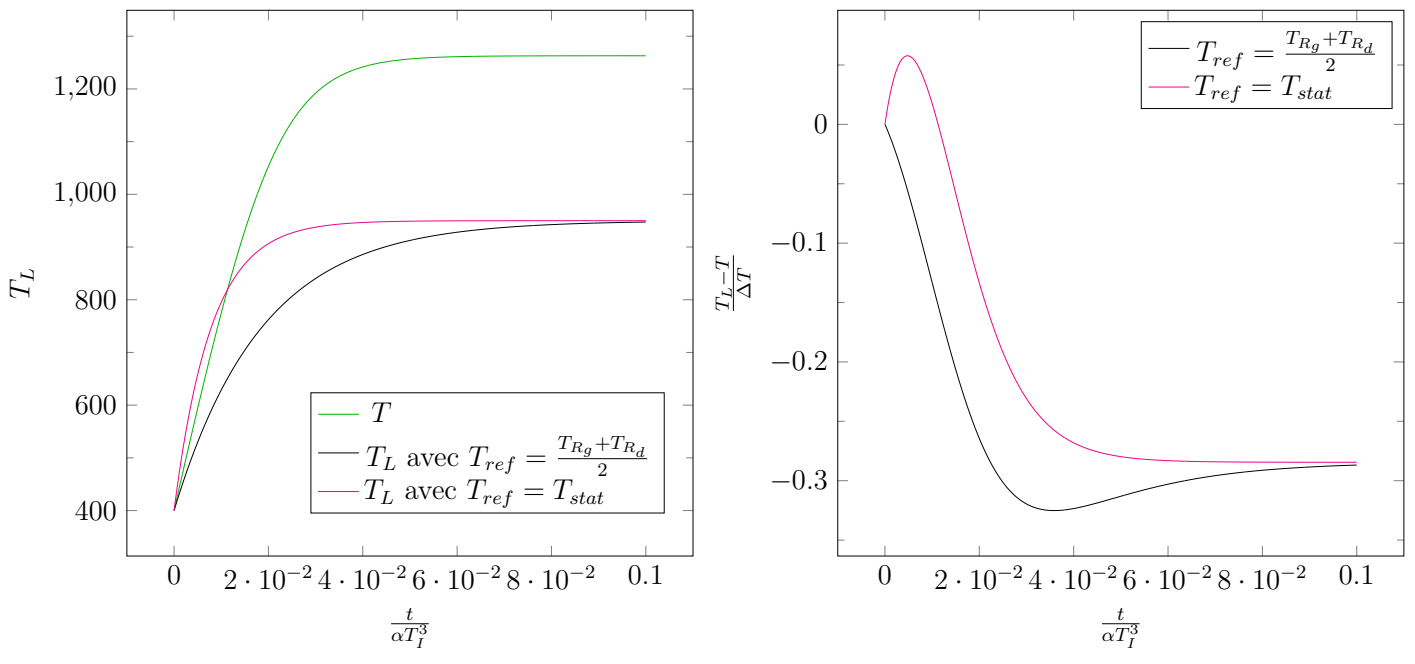
où l'on note T_I la condition initiale à l'instant t_I et T_L la température solution du problème linéarisé. Pour comprendre qu'elles sont les conditions de validité de l'approximation de T par T_L , nous présentons deux résultats de mise en oeuvre dans deux situations typiques : une représentant une situation dans l'habitat où les différences de température sont de l'ordre de vingt degrés entre la température extérieure et intérieure de l'habitation (figure J.1a), et une autre représentant une situation d'un four industriel où une paroi est chauffée à $1500K$ et une autre paroi maintenue à une température de $400K$ (figure J.1b). Cette figure J.1 mettant en évidence le fait que

- la température de référence T_{ref} n'intervient que sur la dynamique temporelle de T_L , autrement-dit, la température linéarisée T_L est indépendante de T_{ref} au stationnaire,
- l'erreur relative $(T_L - T)/\Delta T$ à l'écart de température $\Delta T = T_{R_d} - T_{R_g}$, dépend de la valeur des conditions aux limites que nous nous sommes fixées, notamment du rapport T_{R_g}/T_{R_d} .

On conjecture alors qu'à T_{R_g} fixé, plus l'écart de température entre T_{R_g} et T_{R_d} est grand, et plus l'erreur relative sera importante. Pour confirmer cette hypothèse, nous choisissons de réaliser une étude au stationnaire, en considérant comme température initiale la plus



(a) **Habitat** : $T_{R_g} = 280K$, $T_{R_d} = 300K$, $T_I = 280K$



(b) **Four** : $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$, $T_I = 400K$

FIGURE J.1 – Evolution des températures T et T_L solutions des équations (5.11) et (J.1) respectivement, et de l'erreur relative $(T_L - T)/\Delta T$ en fonction du temps adimensionné $t/\alpha T_I^3$, pour deux températures de références, dans deux situations : une première figure (a) où le rapport T_{R_d}/T_{R_g} est proche de un, et une deuxième figure (b) où le rapport T_{R_d}/T_{R_g} est petit. La température T_{stat} est la température stationnaire solution de l'équation (5.11).

petite des deux $T_I = \min(T_{R_g}, T_{R_d})$ et $T_{R_g} \leq T_{R_d}$. Dans ce cas, le problème est entièrement piloté par un seul paramètre noté ϵ vérifiant $\epsilon = |(T_{R_d}/T_{stat})^4 - (T_{R_g}/T_{stat})^4|/2$ où $T_{stat} =$

$((T_{R_d}^4 + T_{R_g}^4)/2)^{1/4} = (\mathbb{E}_{T_\Gamma}(T_\Gamma^4))^{1/4}$. Ce paramètre ϵ est compris entre 0 et 1 et caractérise le rapport des températures T_{R_g}/T_{R_d} : plus ce rapport sera proche de zéro et plus ϵ sera proche de 1, au contraire, plus se rapport sera proche de un et plus ϵ sera proche de zéro. Les résultat de l'évolution de l'erreur relative (au stationnaire) en fonction du paramètre ϵ sont présentés dans la figure J.2.

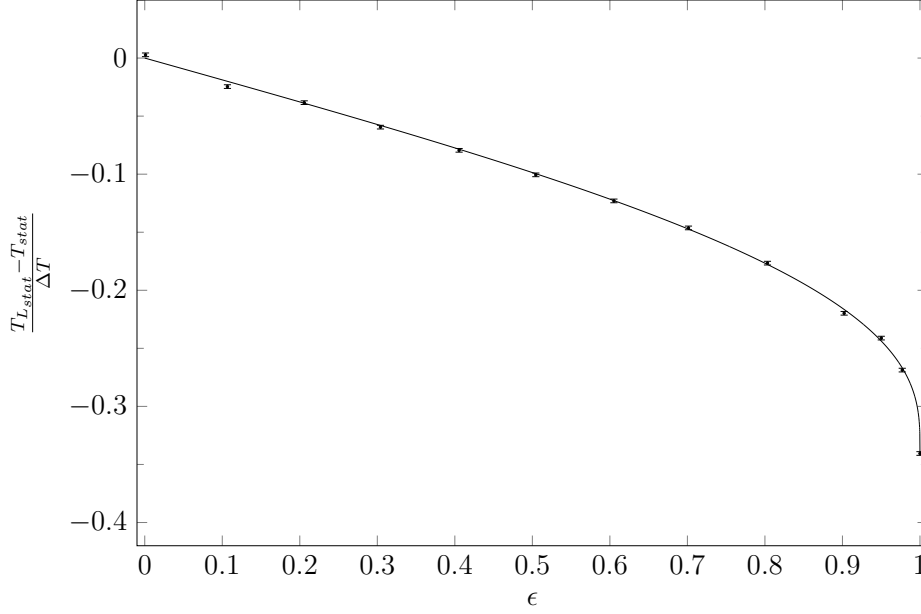


FIGURE J.2 – Evolution de l'erreur relative $(T_{Lstat} - T_{stat})/\Delta T$ en fonction du paramètre ϵ où T_{stat} et T_{Lstat} sont les solutions stationnaires des équations (5.11) et (J.1) respectivement.

Cette figure permet de confirmer notre hypothèse : lorsque le paramètre ϵ tend vers zéro, i.e. lorsque le rapport de T_{R_g}/T_{R_d} tend vers un, alors l'erreur relative tend vers zéro. Dans ce cas là, l'approximation de T par T_L est acceptable en fonction de l'erreur que l'on tolère¹. En revanche, lorsque le paramètre ϵ tend vers un, i.e. lorsque le rapport de T_{R_g}/T_{R_d} tend vers zéro, alors l'erreur relative tend vers une valeur finie égal à $(1/2 - (1/2)^{1/4})/1 \approx -0.3409$ qui correspond à la valeur de l'erreur relative quand le rapport de T_{R_g}/T_{R_d} est nulle² et l'approximation de T par T_L n'est plus acceptable. Rappelons que ces résultats sont obtenus pour des facteurs de formes $1/2$ vers T_{R_g} et $1/2$ vers T_{R_d} .

J.2 Mise en oeuvre de la méthode de Picard

Pour remédier à cette erreur due à la linéarisation, nous employons la stratégie de Picard établie précédemment où la suite $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ vérifie,

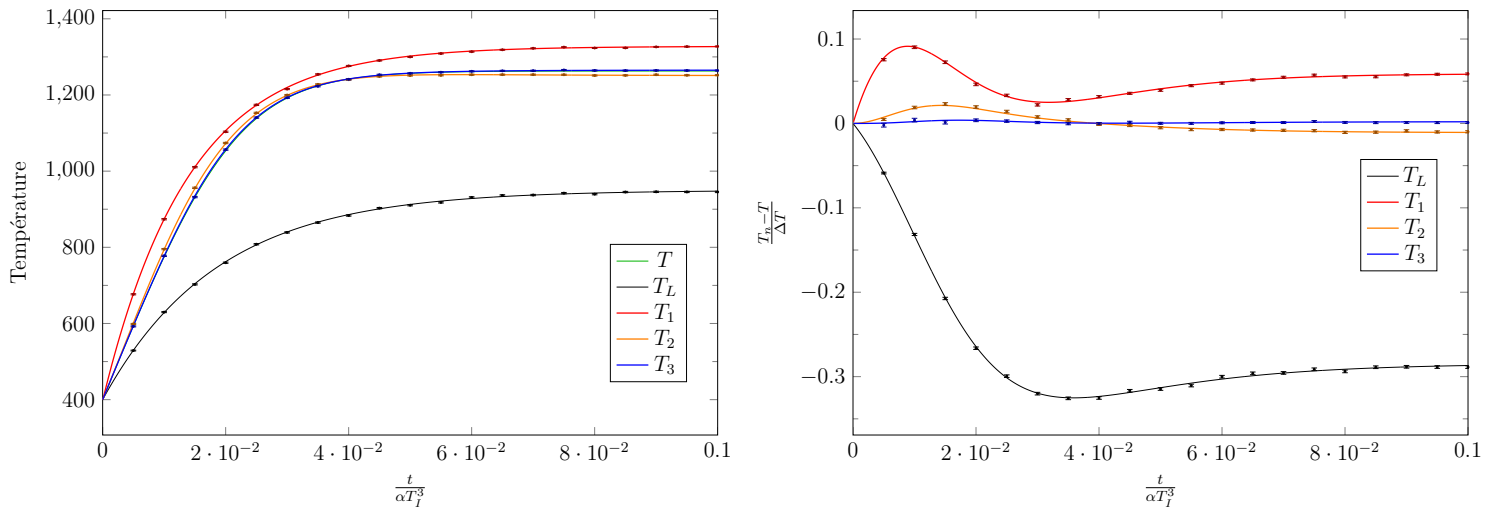
$$\forall n \geq 1, \quad \rho C V \frac{dT_n}{dt} = -4S\sigma \mathbb{E}_{\Theta_\Gamma} \left((T_{n-1}^3 + T_{n-1}^2 \Theta_\Gamma + T_{n-1} \Theta_\Gamma^2 + \Theta_\Gamma^3) (T_n - \Theta_\Gamma) \right) \quad (J.2)$$

1. si nous nous donnons une tolérance sur l'erreur relative de dix pour-cent, et que nous fixons la valeur de la température T_{R_g} , alors la température T_{R_d} doit être comprise dans l'intervalle $[0.5463T_{R_g}, 1.8307T_{R_g}]$ pour que l'erreur relative $(T_L - T)/T$ au stationnaire soit au plus de dix pour-cent. Prenons un exemple : si nous choisissons $T_{R_g} = 300K$ et une erreur relative de dix pour-cent, alors la température $T_{R_d} \in [163.89K, 549.21K]$

2. le rapport est nulle dans le cas où $T_{R_g} < T_{R_d}$, dans le cas contraire, ce rapport serait infini.

où nous choisissons comme condition initiale $T_I = \min(T_{R_g}, T_{R_d})$ à l'instant t_I pour chaque entier n . L'échantillonnage d'une réalisation de la variable aléatoire Θ_n associé à la température T_n , est décrit dans l'Algorithme 23. Les résultats obtenus à partir de cet algorithme, dans la même configuration que celle décrite figure J.1b, sont présentés en prenant comme initialisation T_0 :

- la température de référence $T_{ref} = (T_{R_g} + T_{R_d})/2$ dans la figure J.3,
- la solution stationnaire T_{stat} dans la figure J.4
- un choix astucieux dépendant du temps, variant de T_I à l'instant t_I jusqu'à T_{stat} au stationnaire, dans la figure J.5. Cette initialisation n'est pas calculée explicitement, elle est remplacée par un échantillonnage.



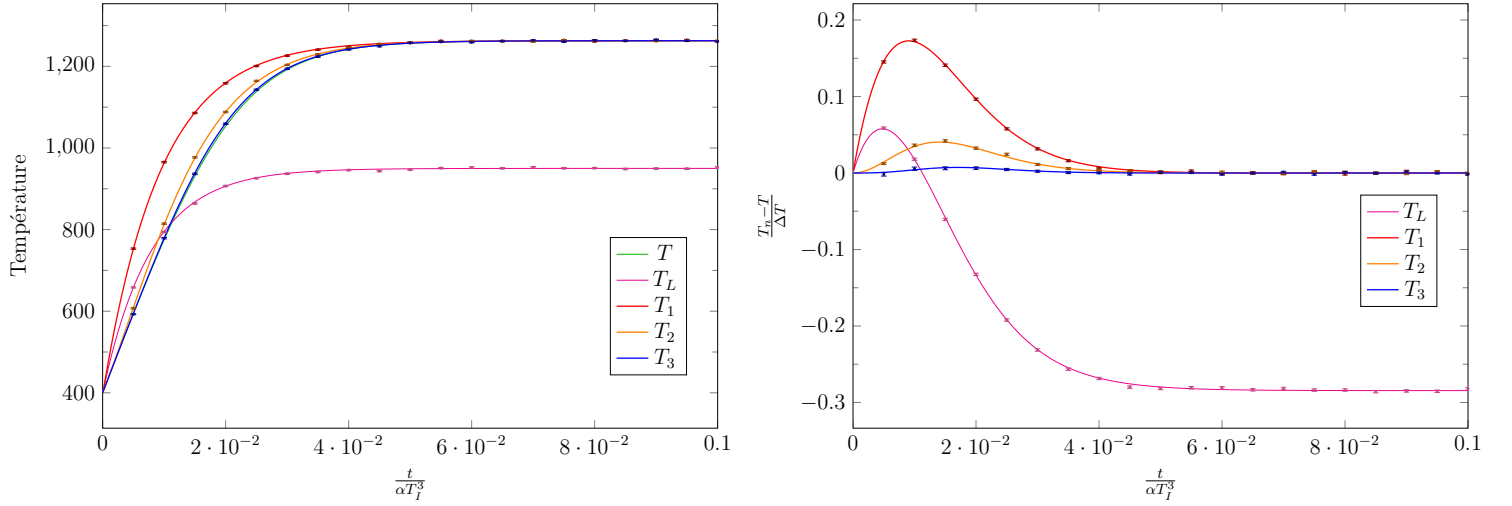
(a) Evolution de la température (figure de gauche) et de l'erreur relative $(T_n - T)/\Delta T$ (figure de droite) en fonction du temps adimensionnel $t/\alpha T_I^3$ où nous considérons l'initialisation $T_0 = T_{ref} = (T_{R_g} + T_{R_d})/2 = 950K$. Les courbes en trait plein sont évaluées par différences finis pour chaque itération, les barres d'erreurs sont obtenus à partir de l'algorithme linéarisé et de l'Algorithme 23 pour l'évaluation des estimations de T_L et T_1, T_2, T_3 respectivement.

Itération de Picard	T_L	T_1	T_2	T_3
Temps de calcul en s	0.36	2.85	6.94	14.37

(b) Temps de calcul pour $N = 100000$ réalisations et vingt points de mesure en fonction de l'itération.

FIGURE J.3 – Résultats obtenus dans la configuration 5.2 avec les mêmes paramètres que ceux de la figure J.1b i.e. avec $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$, $T_I = 400K$ où nous considérons l'initialisation $T_0 = T_{ref} = (T_{R_g} + T_{R_d})/2 = 950K$. Dans la figure J.3a, les courbes en trait plein (obtenus par différences finis) de couleur noir, rouge, orange et bleu représentent la température (à gauche) et les erreurs relatives (à droite) des températures T_L , T_1 , T_2 et T_3 par rapport à T en fonction du temps adimensionnel $t/\alpha T_I^3$. Pour chacune de ces courbes, nous avons employé l'algorithme linéarisé pour retrouver les estimations associées à T_L et l'Algorithme 23 pour celles associées à T_1 , T_2 et T_3 . Dans la table figure J.3b, nous présentons les temps de calcul pour vingt points, un nombre de réalisation de $N = 100000$, en fonction de l'itération. Nous rappelons dans la deuxième colonne le temps de calcul pour l'évaluation de la température T_L .

A partir de ces trois illustrations J.3, J.4 et J.5, on identifie les six propriétés suivantes :



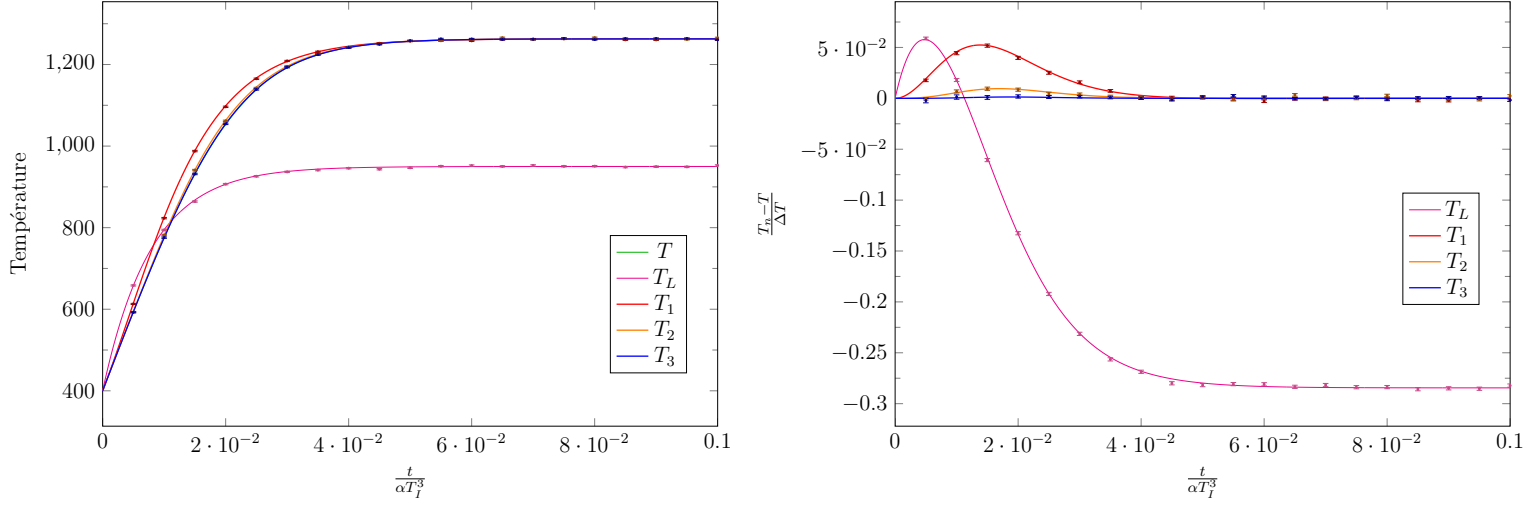
(a) Evolution de la température (figure de gauche) et de l'erreur relative $(T_n - T)/\Delta T$ (figure de droite) en fonction du temps adimensionnalisé $t/\alpha T_I^3$ où nous considérons l'initialisation $T_0 = T_{ref} = T_{stat} = 1263K$. Les courbes en trait plein sont évaluées par différences finis pour chaque itération, les barres d'erreurs sont obtenus à partir des l'algorithmes linéarisé et l'Algorithme 23 pour l'évaluation des estimations de T_L et T_1, T_2, T_3 respectivement.

Itération de Picard	T_L	T_1	T_2	T_3
Temps de calcul en s	0.38	1.93	5.81	12.24

(b) Temps de calcul pour $N = 100000$ réalisations et vingt points de mesure en fonction de l'itération.

FIGURE J.4 – Résultats obtenus dans la configuration 5.2 avec les mêmes paramètres que ceux de la figure J.1b i.e. avec $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$, $T_I = 400K$ où nous considérons l'initialisation $T_0 = T_{ref} = T_{stat} = 1263K$. Dans la figure J.4a, les courbes en trait plein (obtenus par différences finis) de couleur noir, rouge, orange et bleu représentent la température (à gauche) et les erreurs relatives (à droite) des températures T_L , T_1 , T_2 et T_3 par rapport à T en fonction du temps adimensionnalisé $t/\alpha T_I^3$. Pour chacune de ces courbes, nous avons employer l'algorithme linéarisé pour retrouver les estimations associées à T_L et l'Algorithme 23 pour celles associées à T_1 , T_2 et T_3 . Dans la table figure J.3b, nous présentons les temps de calcul pour vingt points, un nombre de réalisation de $N = 100000$, en fonction de l'itération. Nous rappelons dans la deuxième colonne le temps de calcul pour l'évaluation de la température T_L .

- La suite (T_n) converge vers la solution T de l'Eq. (5.11) d'après les figures J.3a, J.4a et J.5a.
- Les estimations de T_n obtenu à partir de l'Algorithme 23 sont non biaisées, les courbes en trait plein étant inclus dans les barres d'erreurs des estimations de MCP.
- Le temps de calcul est une fonction croissante de l'itération d'après les tables J.3b, J.4b et J.5b. La prise en compte des transferts par conduction et convection entrainera une augmentation du temps de calcul (le chemin à échantillonner étant plus long), mais en revanche les rapports entre les temps de calculs des différentes itérations seront conservés.
- L'itération T_1 est une meilleure approximation de T que T_L , les deux étant des algorithmes non branchant, car issu d'équations linéaires. On remarque que le temps de calcul de T_1 est supérieur à celui de T_L , cette différence est simplement due à l'emploie



(a) Evolution de la température (figure de gauche) et de l'erreur relative $(T_n - T)/\Delta T$ (figure de droite) en fonction du temps adimensionnalisé $t/\alpha T_I^3$ où nous considérons l'initialisation $T_0(t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau (\mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) T_{ref})$ avec $T_{ref} = T_{stat} = 1263K$. Les courbes en trait plein sont évaluées par différences finis pour chaque itération, les barres d'erreurs sont obtenus à partir de l'algorithme linéarisé et de l'Algorithme 23 pour l'évaluation des estimations de T_L et T_1, T_2, T_3 respectivement.

Itération de Picard	T_L	T_1	T_2	T_3
Temps de calcul en s	0.38	2.22	6.56	13.40

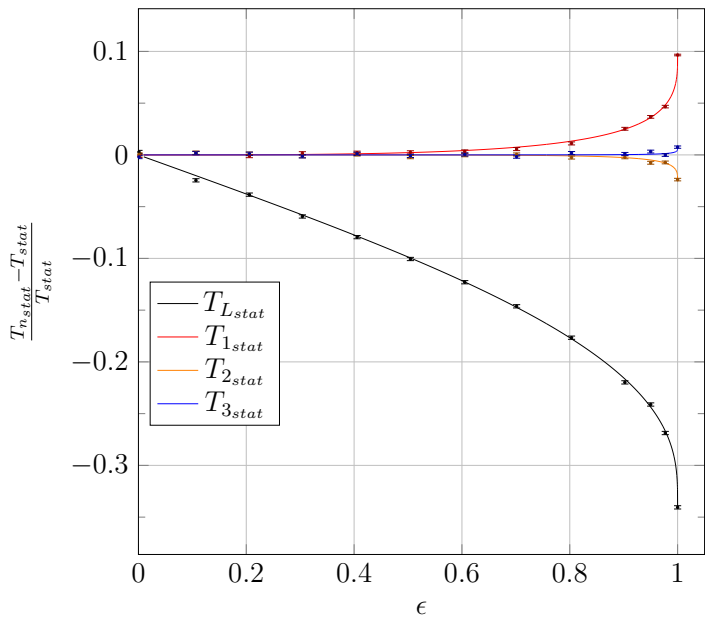
(b) Temps de calcul pour $N = 100000$ réalisations et vingt points de mesure en fonction de l'itération.

FIGURE J.5 – Résultats obtenus dans la configuration 5.2 avec les mêmes paramètres que ceux de la figure J.1b i.e. avec $T_{R_g} = 400K$, $T_{R_d} = 1500K$, $T_I = 400K$, $T_{ref} = T_{stat} = 1263K$ où nous considérons l'initialisation $T_0(t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{T}}(\tau) d\tau (\mathcal{H}(t_I > t - \tau) T_I + \mathcal{H}(t_I < t - \tau) T_{ref})$. Cette initialisation n'est pas prés calculée, elle est remplacée par un échantillonnage de MC. Dans la figure J.4a, les courbes en trait plein (obtenus par différences finis) de couleur noir, rouge, orange et bleu représentent la température (à gauche) et les erreurs relatives (à droite) des températures T_L , T_1 , T_2 et T_3 par rapport à T en fonction du temps adimensionnalisé $t/\alpha T_I^3$. Pour chacune de ces courbes, nous avons employer l'algorithme linéarisé pour retrouver les estimations associées à T_L et l'Algorithme 23 pour celles associées à T_1 , T_2 et T_3 . Dans la table figure J.3b, nous présentons les temps de calcul pour vingt points, un nombre de réalisation de $N = 100000$, en fonction de l'itération. Nous rappelons dans la deuxième colonne le temps de calcul pour l'évaluation de la température T_L .

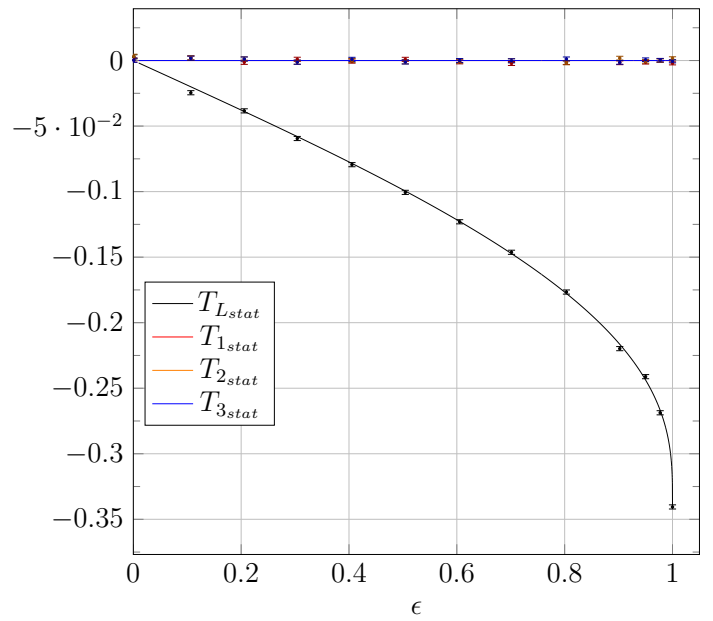
des collisions nulles.

- Contrairement à la température linéarisée T_L , les solutions stationnaires des itérations (T_n) dépendent du choix de la température de référence (voir Figures J.3 et J.4).
- Les figures J.3a, J.4a et J.5a mettent en évidence que la vitesse de convergence de l'algorithme est pilotée par le choix de l'initialisation.

En résumé la suite (T_n) est une suite convergente de limite T solution de l'Eq. (5.11), l'itération T_1 est une meilleure approximation de T que T_L ces deux températures étant issues d'un algorithme de MC linéaire non branchant, la figure J.6 montre que cette conclusion reste vraie (au stationnaire) quelque soit la valeur du paramètre ϵ . De plus, quelque soit le choix de l'initialisation, on constate que l'itération T_2 est une approximation de T acceptable !



(a) $T_{ref} = \frac{T_{Rg} + T_{Rd}}{2}$



(b) $T_{ref} = T_{stat}$

FIGURE J.6 – Evolution de l'erreur relative $(T_{n_{stat}} - T_{stat})/T_{stat}$ en fonction du paramètre ϵ où T_{stat} est la solution stationnaire de l'Eq. (5.11), T_n est la solution stationnaire de l'Eq. (J.2) et T_L (courbe en noire) est la solution stationnaire de l'Eq. (J.1) pour deux valeurs de température de référence.

Annexe K

Algorithmes de Monte-Carlo

K.1 σT^4

Algorithme 23 : Échantillonnage de θ_n suivant Θ_n au point $\vec{x} \in \Omega \setminus \partial\Omega$ à l'instant t .
Le poids de Monte-Carlo est $w = \theta_n$.

```
1 Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$  ;
2 Mettre à jour le pas de discrétisation  $\delta \equiv \delta(\vec{x}, \vec{u})$  ;
3 Échantillonner  $\tau$  suivant  $\mathcal{T}(\vec{x}, \vec{u})$  ;
4  $t = t - \tau$  ;
5 if  $t_I > t$  then
6   |  $w = T_I(\vec{x})$  ;
7 else
8   |  $\vec{x} = \vec{x} + \delta\vec{u}$  ;
9   | if  $\vec{x} \in \overset{\circ}{\Omega}$  then
10    | Échantillonner  $\theta_n$  suivant  $\Theta_n$  au point  $(\vec{x}, t)$  ;
11    |  $w = \theta_n$  ;
12  else
13    | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$  ;
14    | Échantillonner  $\theta_{1,n-1}, \theta_{2,n-1}$  et  $\theta_{3,n-1}$  suivant  $\Theta_{b,n-1}$  au point  $(\vec{x}, t)$  ;
15    | Échantillonner  $\gamma$  suivant  $\Gamma$  au point  $(\vec{x}, t)$  ;
16    | Échantillonner  $\theta_{1,\gamma,n-1}, \theta_{2,\gamma,n-1}$  et  $\theta_{3,\gamma,n-1}$  suivant  $\Theta_{b,n-1}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$  ;
17    |  $p_{R,n-1} = \sigma(\theta_{1,n-1}\theta_{2,n-1}\theta_{3,n-1} + \theta_{1,n-1}\theta_{2,n-1}\theta_{1,\gamma,n-1} + \theta_{1,n-1}\theta_{1,\gamma,n-1}\theta_{2,\gamma,n-1} +$   

18    |  $\theta_{1,\gamma,n-1}\theta_{2,\gamma,n-1}\theta_{3,\gamma,n-1})/\hat{\alpha}$  ;
19    |  $p_\delta = \lambda/(\delta\hat{\alpha})$  ;
20    |  $p_F = h_F/\hat{\alpha}$  ;
21    | if  $r < p_{R,n-1}$  then
22    |   | Échantillonner  $\theta_{\gamma_4,n}$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$  ;
23    |   |  $w = \theta_{\gamma_4,n}$  ;
24    | else if  $p_{R,n-1} < r < p_{R,n-1} + p_\delta$  then
25    |   | Échantillonner  $\theta_{\delta,n}$  suivant  $\Theta_n$  au point  $(\vec{x} - \delta\vec{n}, t)$  ;
26    |   |  $w = \theta_{\delta,n}$  ;
27    | else if  $p_{R,n-1} + p_\delta < r < p_{R,n-1} + p_\delta + p_F$  then
28    |   |  $w = T_F$  ;
29    | else
30    |   | Échantillonner  $\theta_{b,n}$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{x}, t)$  ;
31    |   |  $w = \theta_{b,n}$  ;
```

où Θ_n et $\Theta_{b,n}$ sont les deux variables aléatoires issues de la lecture statistique de l'équation (5.10) et $\hat{\alpha} = \lambda/\delta + 4\sigma T_{max}^3 + h$ avec T_{max} la température maximale imposée dans le système. Il est intéressant de remarquer qu'il est possible d'optimiser cet algorithme en modifiant les lignes 14 – 30. Cette optimisation a lieu au moment où l'on doit choisir le mode de propagation futur de la particule, i.e. si elle continue son chemin en conduction avec la probabilité p_δ , en convection avec la probabilité p_F , en rayonnement avec la probabilité p_R , où continue de manière récursive avec la probabilité p_b . Pour cela, on échantillonne un nombre noté r , uniformément dans l'intervalle $[0, 1]$ (ligne 13), puis on exécute les lignes 14 – 30 de l'Algorithme 23. Malheureusement, dans ce cas, il est alors nécessaire de générer six branches de l'itération $n - 1$ (voir lignes 14 et 16). Ces six branches sont à leurs tour, à l'origine de six nouvelles branches de l'itération $n - 2$ et ainsi de suite. Le nombre de branche peut alors exploser très rapidement avec la croissance de l'itération, rendant l'algorithme impraticable. L'optimisation proposée ici, consiste à remplacer les lignes 14 – 30 par les étapes décrites ci-dessous, l'objectif étant de diminuer le nombre de branches générées le long d'une trajectoire :

- Premièrement, on remarque que les probabilités $p_\delta = \lambda/(\delta\hat{\alpha})$ et $p_F = h_F/\hat{\alpha}$ sont indépendantes de la valeur des réalisations $\theta_{1,n-1}$, $\theta_{2,n-1}$, $\theta_{3,n-1}$, $\theta_{1,\gamma,n-1}$, $\theta_{2,\gamma,n-1}$ et $\theta_{3,\gamma,n-1}$. Ainsi, il est judicieux de tester si la particule part en conduction ou en convection avant d'échantillonner les six réalisations de Θ via les tests $r < p_\delta$ et $r < p_\delta + p_F$, et si c'est effectivement le cas, alors nous évitons d'échantillonner ces six réalisations pour rien. Cette astuce permet d'éviter de créer six branches avec la probabilité $p_\delta + p_F$.
- Deuxièmement, on remarque que quelque soit la valeur des six réalisations $\theta_{1,n-1}$, $\theta_{2,n-1}$, $\theta_{3,n-1}$, $\theta_{1,\gamma,n-1}$, $\theta_{2,\gamma,n-1}$ et $\theta_{3,\gamma,n-1}$, la probabilité $p_{R,n-1}$ est minorée par $p_{R_{min}} = 4\sigma T_{min}^3/\hat{\alpha}$ i.e. $p_{R_{min}} \leq p_{R,n-1}$. Ainsi, après avoir testé si la particule part en conduction ou convection, il est astucieux de tester si elle part en rayonnement avec la probabilité $p_{R_{min}}$. Pour réaliser ce test, il suffit de vérifier si $p_\delta + p_F < r < p_\delta + p_F + p_{R_{min}}$. Si c'est le cas, alors on aura une nouvelle fois évité de générer six branches. Cet astuce permet d'éviter de créer six branches avec la probabilité $p_{R_{min}}$.
- Troisièmement, si la particule n'est ni partie en conduction ou convection avec la probabilité $p_\delta + p_F$, ni partie en rayonnement avec la probabilité $p_{R_{min}}$, i.e. $r > p_\delta + p_F + p_{R_{min}}$, alors il est possible d'échantillonner une réalisation $\theta_{1,n-1}$ de Θ , puis en remarquant que $p_{R,n-1}$ est minorée par $p_{R_{min1}} = \sigma(3\theta_{1,n-1}T_{min} + T_{min}^3)/\hat{\alpha}$ et majorée par $p_{R_{max1}} = \sigma(3\theta_{1,n-1}T_{max} + T_{max}^3)/\hat{\alpha}$, tester si elle part en rayonnement via le test $p_\delta + p_F + p_{R_{min}} < r < p_\delta + p_F + p_{R_{min1}}$ et si elle continue récursivement via le test $p_\delta + p_F + p_{R_{max1}} < r$. Si l'un des deux cas est réalisé, alors on aura eu besoin d'une seule branche, au lieu de six, pour décider le mode de propagation futur de la particule.
- On recommence de la même façon pour les cinq autres réalisations $\theta_{2,n-1}$, $\theta_{3,n-1}$, $\theta_{1,\gamma,n-1}$, $\theta_{2,\gamma,n-1}$ et $\theta_{3,\gamma,n-1}$.

L'algorithme que l'on obtient est le même que l'Algorithme 23 où les lignes 14 – 30 ont été remplacées par celles ci-dessous :

```

1 Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
2 Échantillonner  $\gamma$  suivant  $\Gamma$  au point  $(\vec{x}, t)$ ;
3  $p_\delta = \frac{\lambda/\delta}{\hat{\alpha}}$ ;
4  $h_{min} = 4\sigma T_{min}^3$ ;
5 if  $r < p_\delta$  then
6   | Échantillonner  $\theta_{\delta,n}$  suivant  $\Theta_n$  au point  $(\vec{x} - \delta\vec{n}, t)$ ;
7   |  $w = \theta_{\delta,n}$ ;
8 else if  $r < p_\delta + p_F$  then
9   |  $w = T_F$ ;
10 else if  $r < p_\delta + p_F + \frac{h_{min}}{\hat{\alpha}}$  then
11   | Échantillonner  $\theta_{\gamma,n}$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$ ;
12   |  $w = \theta_{\gamma,n}$ ;
13 else
14   | Échantillonner  $\theta_{1,n-1}$  suivant  $\Theta_{b,n-1}$  au point  $(\vec{x}, t)$ ;
15   |  $p_{R_{min1}} = \sigma (3\theta_{1,n-1}T_{min} + T_{min}^3) / \hat{\alpha}$ ;
16   |  $p_{R_{max1}} = \sigma (3\theta_{1,n-1}T_{max} + T_{max}^3) / \hat{\alpha}$ ;
17   | if  $r < p_\delta + p_F + p_{R_{min1}}$  then
18     | Échantillonner  $\theta_{\gamma,n}$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$ ;
19     |  $w = \theta_{\gamma,n}$ ;
20   | else if  $p_\delta + p_F + p_{R_{max1}} < r$  then
21     | Échantillonner  $\theta_n$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{x}, t)$ ;
22     |  $w = \theta_n$ ;
23   | else
24     | Échantillonner  $\theta_{2,n-1}$  suivant  $\Theta_{b,n-1}$  au point  $(\vec{x}, t)$ ;
25     |  $p_{R_{min2}} = \sigma (\theta_{1,n-1}\theta_{2,n-1}T_{min} + 2\theta_{1,n-1}T_{min}^2 + T_{min}^3) / \hat{\alpha}$ ;
26     |  $p_{R_{max2}} = \sigma (\theta_{1,n-1}\theta_{2,n-1}T_{max} + 2\theta_{1,n-1}T_{max}^2 + T_{max}^3) / \hat{\alpha}$ ;
27     | if  $r < p_\delta + p_F + p_{R_{min2}}$  then
28       | Échantillonner  $\theta_{\gamma,n}$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$ ;
29       |  $w = \theta_{\gamma,n}$ ;
30     | else if  $p_\delta + p_{R_{max2}} < r$  then
31       | Échantillonner  $\theta_n$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{x}, t)$ ;
32       |  $w = \theta_n$ ;
33     | else
34       | ••• (idem  $\theta_{3,n-1}, \theta_{1,\gamma,n-1}, \theta_{2,\gamma,n-1}$ )
35       | Échantillonner  $\theta_{3,\gamma,n-1}$  suivant  $\Theta_{b,n-1}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$ ;
36       |  $p_{R_{min,n-1}} = \sigma \left( \begin{array}{l} \theta_{1,n-1}\theta_{2,n-1}\theta_{3,n-1} + \theta_{2,n-1}\theta_{1,n-1}\theta_{1,\gamma,n-1} \\ + \theta_{1,n-1}\theta_{1,\gamma,n-1}\theta_{2,\gamma,n-1} + \theta_{1,\gamma,n-1}\theta_{2,\gamma,n-1}\theta_{3,\gamma,n-1} \end{array} \right) / \hat{\alpha}$ ;
37       | if  $r < p_\delta + p_F + p_{R_{min,n-1}}$  then
38         | Échantillonner  $\theta_{\gamma,n}$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{y}_\gamma, t)$ ;
39         |  $w = \theta_{\gamma,n}$ ;
40       | else
41         | Échantillonner  $\theta_n$  suivant  $\Theta_{b,n}$  au point  $(\vec{x}, t)$ ;
42         |  $w = \theta_n$ ;

```

K.2 $h_F(T)$

Algorithme 24 : Fonction $F_\Theta(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F_Θ ou de F_{Θ_b} à la position \vec{x}' au temps t' .

```

1 Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$ ;
2 Mettre à jour le pas de discrétisation  $\delta \equiv \delta(\vec{x}, \vec{u})$ ;
3 Échantillonner  $\tau$  suivant  $\mathcal{T}(\vec{x}, \vec{u})$ ;
4  $t' = t - \tau$ ;
5 if  $t_I > t'$  then
6   |  $w = T_I(\vec{x})$ ;
7 else
8   |  $\vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{u}$ ;
9   | if  $\vec{x}' \in \overset{\circ}{\Omega}$  then
10  |   |  $w = F_\Theta(\vec{x}', t')$ ;
11  |   else
12  |   |  $w = F_{\Theta_b}(\vec{x}', t')$ ;

```

Algorithme 25 : Fonction $F_{\Theta_b}(\vec{y}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ_b à la position \vec{y} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est systématiquement reporté dans un appel récursif de F_{Θ_b} ou de F_Θ à la position \vec{y} ou $\vec{y} - \delta\vec{n}$ au temps t .

```

1  $\theta = F_{\Theta_b}(\vec{y}, t)$ ;
2  $p_F = h_F(\theta)/\hat{k}$ ;
3  $p_\delta = \lambda/\delta\hat{k}$ ;
4 Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
5 if  $r < p_\delta$  then
6   |  $w = F_\Theta(\vec{y} - \delta\vec{n}, t)$ ;
7 else if  $p_\delta < r < p_\delta + p_F$  then
8   |  $w = T_F$ ;
9 else
10  |  $w = F_{\Theta_b}(\vec{y}, t)$ ;

```

K.3 $C(T)$

Algorithme 26 : Fonction $F_\Theta(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F_Θ à la position \vec{x} ou $\vec{x} + \delta\vec{u}$ au temps t' .

```

1 Échantillonner  $s$  suivant  $\mathcal{T}$ ;
2  $t' = t - s$ ;
3 if  $t_I > t'$  then
4   |  $w = T_I(\vec{x})$ ;
5 else
6   |  $\theta = F_\Theta(\vec{x}, t')$ ;
7   |  $p = k(\theta)/\hat{k}$ ;
8   | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
9   | if  $r < p$  then
10  |   | Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$ ;
11  |   |  $w = F_\Theta(\vec{x} + \delta\vec{u}, t')$ ;
12  | else
13  |   |  $w = F_\Theta(\vec{x}, t')$ ;

```

K.4 $\lambda(T)$

La suite d'approximation est notée $(T_n)_{n\mathbb{N}}$, et la formulation intégrale associée est l'équation intégrale (K.1).

$$\tilde{T}_n(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du \underbrace{\int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l') dl' \left(\begin{array}{c} \mathcal{H}(t_I > t - t') T_I(\vec{x} - ct\vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - t') \left(\begin{array}{c} p(\tilde{T}_{n-1}) \tilde{T}_n \\ + (1 - p(\tilde{T}_{n-1})) f_{\vec{u},n} \end{array} \right)_{(\vec{x}', t-t')} \end{array} \right)}_{f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t)} \quad (\text{K.1})$$

où \tilde{T}_0 est un champ de température choisi arbitrairement et $p(\tilde{T}) = \lambda_{\min}/\lambda(\tilde{T})$ une probabilité.

A ce stade, on peut noter deux points importants lors de la conception de l'algorithme de Monte-Carlo :

- Premièrement, nous remarquons que le champ de température T_1 n'est rien d'autre que le champ de température où la conductivité est connue, égal à $\lambda(T_0)$. Par conséquent, T_1 est solution de l'équation de la chaleur linéaire, celle que nous avons résolu par Monte-Carlo dans le Chapitre 3 en utilisant la marche sur δ -sphere. Puisque la marche sur δ -sphere est performante dans le cas linéaire, voir les résultats présentés dans l'Annexe H, nous faisons le choix de calculer ce champ de température via cette marche. Les résultats présentés dans la section 5.3.3.1 sont obtenus en employant la marche sur δ -sphere pour l'évaluation de \tilde{T}_1 .
- Deuxièmement, nous devons gérer la non-linéarité induite par l'expression de la probabilité $p = \lambda_{\min}/\lambda(\tilde{T})$. Comme expliqué dans la section 4.1.2, pour éviter les problèmes de non-linéarité liés à l'estimation de l'espérance d'une fonction non-linéaire d'une espérance, nous choisissons de n'étudier que des matériaux pour lesquels il

est possible de linéariser la dépendance à T de $1/\lambda$ dans le but d'avoir la propriété $1/\lambda(\mathbb{E}_{\Theta_n}(\Theta_n)) = \mathbb{E}_{\Theta_n}(1/\lambda(\Theta_n))$ où Θ_n est la variable aléatoire issue de la lecture statistique de la formulation intégrale (K.1), qui est bien définie une fois cette hypothèse sur la conductivité établie.

Nous en déduisons l'algorithme de Monte-Carlo évaluant une estimation de \tilde{T}_n pour $n > 1$ suivant,

Algorithme 27 : Fonction $F_{\Theta_n}(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ_n à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F_{Θ_n} à la position \vec{x}' au temps t' .

```

1  $\vec{x}' = \vec{x}$ ;
2  $t' = t$ ;
3 while  $t_I < t'$  do
4   Échantillonner  $\vec{u}$  suivant  $\vec{U}$ ;
5    $Coll\_Null = .true.$ ;
6   while  $Coll\_Null$  do
7     Échantillonner  $l$  suivant  $\mathcal{L}$ ;
8      $t' = t' - l/c$ ;
9     if  $t_I > t'$  then
10      |  $w = T_I(\vec{x}' - c(t' - t_I)\vec{u})$ ;
11     else
12      |  $\vec{x}' = \vec{x}' - l\vec{u}$ ;
13      | Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
14      | if  $r < \lambda_{min}/\lambda_{max}$  then
15      | |  $w = F_{\Theta_n}(\vec{x}', t')$ ;
16      | else
17      | |  $\theta_{n-1} = F_{\Theta_{n-1}}(\vec{x}', t')$  (génération d'une branche de l'itération  $n - 1$ );
18      | |  $p = \lambda_{min}/\lambda(\theta_{n-1})$ ;
19      | | if  $r < p$  then
20      | | |  $Coll\_Null = .false.$ ;

```

où l'on choisit d'utiliser la marche sur δ -sphere pour évaluer \tilde{T}_1 ce qui implique que la variable aléatoire Θ_1 est associée à la marche sur δ -sphere.

Remarque : le libre parcours moyen de l'ordre n peut être choisi indépendamment de celui de l'ordre $n - 1$ et des précédents.

A ce stade, il est intéressant de constater que nous avons optimisé cet algorithme en utilisant le fait que la probabilité échantillonnée $\lambda_{min}/\lambda(\theta_{n-1})$, est minorée par $\lambda_{min}/\lambda_{max}$ où λ_{max} est le majorant de la conductivité sur la gamme des températures imposées aux conditions aux limites. Ainsi, au lieu d'échantillonner systématiquement une réalisation de Θ_{n-1} à chaque collision, nous utilisons cette minoration pour éviter un échantillonnage systématique ! Cette astuce permet d'éviter de générer une branche avec la probabilité $\lambda_{min}/\lambda_{max}$ à chaque collision.

K.4.1 Choix de la conductivité et adimensionnalisation

Comme mentionné précédemment, pour que la formulation intégrale (K.1) soit implémentable, nous choisissons le profil de conductivité suivant,

$$\frac{1}{\lambda(T)} = \frac{1}{\lambda_{ref}} + \beta(T - T_{ref}) \quad (\text{K.2})$$

où λ_{ref} serait la conductivité du matériau sans prendre en compte la non-linéarité, T_{ref} la température de référence et β un paramètre permettant de piloter l'importance de la non-linéarité. Il est intéressant de remarquer que le choix de la température de référence T_{ref} est arbitraire puisque les paramètres β et λ_{ref} sont libres. Par conséquent, nous choisissons de fixer la température de référence T_{ref} à la température $(T_{max} - T_{min})/2$.

Dans le but de présenter les résultats obtenu à partir de l'Algorithme 27, nous réalisons une adimensionnalisation du problème : on considère le problème en dimension un, au stationnaire, dans un slab de longueur L ,

$$\begin{cases} \partial_x (\lambda(T) \partial_x T) = 0 \\ T(0) = T_g \\ T(L) = T_d \end{cases} \quad (\text{K.3})$$

En posant $\mathcal{T}(\tilde{x}) = (T(x) - T_g)/\Delta T$, où $\Delta T = |T_d - T_g|$, $\tilde{x} = x/L$ et en supposant que $T_d > T_g$ par symétrie, on obtient :

$$\begin{cases} \partial_{\tilde{x}} \left(\frac{1}{1 + \frac{\beta \lambda_{ref} \Delta T}{2} (2\mathcal{T} - 1)} \partial_{\tilde{x}} \mathcal{T} \right) = 0 \\ \mathcal{T}(0) = 0 \\ \mathcal{T}(1) = 1 \end{cases} \quad (\text{K.4})$$

L'unique paramètre adimensionnel est noté α , il vérifie $\alpha = \beta \lambda_{ref} \Delta T / 2$. Il est intéressant de remarquer que si $\beta \lambda_{ref} > 0$ alors $\alpha \in [0, 1]$, et que si $\beta \lambda_{ref} < 0$ alors $\alpha \in [-1, 0]$. Ce paramètre α est facilement interprétable : lorsque α est proche de 0 le comportement est proche du problème linéaire et lorsque $|\alpha|$ est proche de 1 le problème est hautement non-linéaire, voir Figures 5.23 et 5.27.

K.4.2 Choix du pas de discrétisation

Puisque dans notre communauté la marche sur δ -sphere est la marche de référence, nous faisons le choix suivant,

Choix : *On choisit le libre parcours moyen δ_{me} en fonction du pas δ de la marche sur δ -sphere de telle sorte que les nombres de collisions moyen des marches méso et δ -sphere soient identiques i.e. temps de calcul (numérique) égaux entre les deux marches.*

Pour choisir δ_{me} en fonction de δ , on se place en milieu infini, en dimension n et on fait l'observation suivante,

Marche sur δ -sphere : En fixant un pas de discrétisation δ et un temps d'observation t , on observe que le temps pour parcourir un pas de longueur δ suit une loi exponentielle de paramètre $\frac{2n\lambda}{\delta^2 \rho C}$. Ainsi le nombre de pas moyen $Nbr_Coll_\delta^t$ réalisé par la marche sur δ -sphere

durant t est $Nbr_Coll_{\delta}^t = t2n\lambda/\delta^2\rho C$.

Marche Meso : En fixant un libre parcours moyen δ_{me} et un temps d'observation t , on observe que la longueur d'un pas suit une loi exponentielle de paramètre $1/\delta_{me}$. La vitesse des particules c est constante et vérifie $c = \frac{n\lambda}{\delta_{me}\rho C}$. Ainsi le nombre de pas moyen $Nbr_Coll_{\delta_{me}}^t$ de la marche méso durant t est $Nbr_Coll_{\delta_{me}}^t = tn\lambda/\delta_{me}^2\rho C$.

Par conséquent, pour que les temps de calcul entre la marche sur δ -sphere et la marche méso soient similaires (proportionnel au nombre de collision), nous devons imposer :

$$\delta_{me} = \frac{\delta}{\sqrt{2}} \quad (\text{K.5})$$

K.4.3 En géométrie confinée : Milne

Rappelons que nous avons utiliser une similitude entre l'équation de la chaleur et l'équation de transport de type Boltzmann pour construire notre algorithme de Monte-Carlo en milieu infini. Pour que cette similitude soit valable, nous avons choisi les propriétés du coefficient de diffusion et les conditions aux limites de la fonction de distribution f . En milieu infini, le choix des propriétés a été naturel, en milieu confiné ce n'est plus le cas. En effet, les conditions de bord sont exprimées à partir de la température et non de la fonction de distribution f . Pour contourner cette difficulté, nous proposons dans l'Annexe G, une stratégie de construction de cette condition de bord sur la fonction de distribution $f_{\partial\Omega}$ obtenue à partir de la température imposée à la frontière $T_{\partial\Omega}$. Avec ce choix, la formulation intégrale de la température T_n en géométrie fermée, vérifie l'égalité ci-dessous,

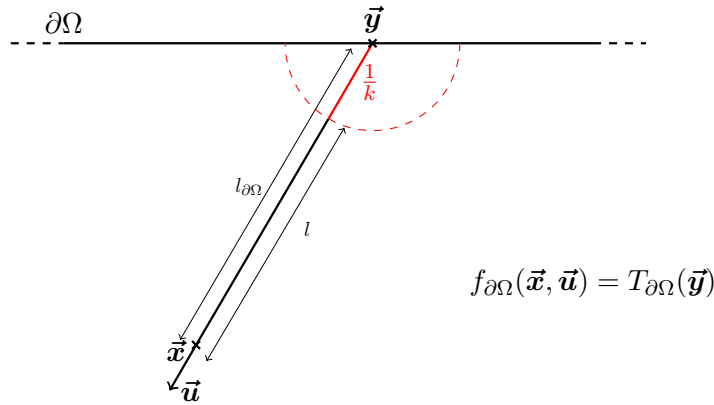
$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{T}_n(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} p_{\vec{U}}(\vec{u}) du f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t) \\ f_{\vec{u},n}(\vec{x}, t) = \mathcal{H}\left(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) < \frac{1}{k_{\partial\Omega}}\right) A(\vec{x}, t) + \mathcal{H}\left(l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) > \frac{1}{k_{\partial\Omega}}\right) B(\vec{x}, t) \\ A(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} e^{-k_{\partial\Omega}l} \left[e^{2k_{\partial\Omega}l} T_{\partial\Omega}(\vec{y}, t + t_l) \right] \\ + (1 - e^{-k_{\partial\Omega}l}) \int_0^l \frac{k_{\partial\Omega} e^{-k_{\partial\Omega}l'}}{1 - e^{-k_{\partial\Omega}l'}} dl' \left[-e^{k_{\partial\Omega}l'} \tilde{T}_n(\vec{x} + (l - l')\vec{u}, t + t_{l-l'}) \right] \end{array} \right) \\ B(\vec{x}, t) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l') dl' \left[\begin{array}{l} \mathcal{H}(l' > l) C(\vec{x}, t) \\ + \mathcal{H}(l' < l) D(\vec{x}, t) \end{array} \right] \\ C(\vec{x}, t) = \mathcal{H}(t_I > t - t_l) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) + \mathcal{H}(t_I < t - t_l) T_{\partial\Omega}(\vec{y}, t - t_l) \\ D(\vec{x}, t) = \left(\begin{array}{l} \mathcal{H}(t_I > t - t_l) T_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u}) \\ + \mathcal{H}(t_I < t - t_l) \left(\begin{array}{l} p(\tilde{T}_{n-1}) \tilde{T}_n \\ + (1 - p(\tilde{T}_{n-1})) f_{\vec{u},n} \end{array} \right)_{|(\vec{x}, t-t')} \end{array} \right) \end{array} \right. \quad (\text{5.19})$$

où

- $k_{\partial\Omega} = k(T_{\partial\Omega}) = \frac{c\rho C}{n\lambda(T_{\partial\Omega})}$,
- $p(T) = \frac{k(T)}{k} = \frac{\lambda_{min}}{\lambda(T)}$ une probabilité,
- \mathcal{L} une v.a. de loi exponentielle de paramètre $1/\delta_{me}$,
- \vec{U} une v.a. de loi uniforme sur la sphère S^{n-1} de dimension n ,
- $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) = \min \left\{ \|\vec{x} - \vec{y}'\| ; \vec{y}' \in \text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) \cap \partial\Omega \right\}$ avec $\text{Vect}^-(\vec{x}, \vec{u}) = \left\{ \vec{x} - s\vec{u} ; s \in \mathbb{R}_+^* \right\}$,
- $l = |l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) - 1/k|$,
- $\vec{y} = \vec{x} - l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) \vec{u}$,
- $t_l = \frac{l}{c}$ le temps pour parcourir une longueur l à la vitesse c ,
- $\vec{x}' = \vec{x} - l'\vec{u}$,
- $c = \frac{n\lambda_{min}}{\rho C \delta_{me}}$ où n est ici la dimension spatiale,

L'échantillonnage de la v.a. Θ_n associée à \tilde{T}_n est décrit dans l'Algorithme 28.

Remarquons que la condition de bord de la fonction de distribution $f_{\partial\Omega}$ ne se situe pas strictement sur le bord du domaine $\partial\Omega$, mais décalée d'un libre parcours moyen à l'intérieur du domaine, dans la direction de propagation, comme expliqué dans l'Annexe G.



La stratégie que nous venons d'employer est bien connue de la littérature, il s'agit de la *condition de Milne* (voir [90, 91]). En pratique, cette stratégie est employée dans le sens contraire du notre où pour résoudre une équation de transport, la similitude et la condition de Milne sont employées pour se ramener à la résolution d'une équation de diffusion. Dans beaucoup de communauté, il est souvent bien plus simple de résoudre une équation de diffusion plutôt qu'une équation de transport, notamment lorsque les paramètres optiques et la géométrie sont complexes. Dans ce manuscrit, nous utilisons une démarche strictement opposée à celle-ci, qui est justifiée par l'emploi d'outils issus du monde de la synthèse d'image. La lecture statistique de l'Eq. (5.19) définit l'algorithme de Monte-Carlo ci-dessous :

Algorithme 28 : Fonction $F_{\Theta_n}(\vec{x}, t)$ d'échantillonnage récursif de Θ_n à la position \vec{x} au temps t . Le poids de Monte-Carlo w est calculé par la fonction elle-même si il est connu ($w = T_I$ ou à un coefficient multiplicatif près $T_{\partial\Omega}$), sinon son calcul est reporté dans un appel récursif de F_{Θ_n} à la position \vec{x}' au temps t' .

```

1  $t = t_0$ ;
2  $\vec{x} = \vec{x}_0$ ;
3 Sortie = .false.;
4  $w = 1$ ;
5 while  $t > t_I$  et Not(Sortie) do
6   Échantillonner  $\vec{u}$  suivant la loi de  $\vec{U}$ ;
7   Évaluer  $k_{\partial\Omega}$  au point  $\vec{y}$  à l'instant  $t$ ;
8   Évaluer  $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u})$ ;
9   if  $l_{\partial\Omega}(\vec{x}, \vec{u}) < 1/k_{\partial\Omega}$  then
10    Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
11    if  $r < e^{-k_{\partial\Omega}l}$  then
12       $w = we^{2k_{\partial\Omega}l}T_{\partial\Omega}(\vec{y}, t + t_l)$ ;
13      Sortie = .true.;
14    else
15      Échantillonner  $l'$  suivant  $k_{\partial\Omega}e^{-k_{\partial\Omega}l'}/1 - e^{-k_{\partial\Omega}l}$  sur  $[0, l]$ ;
16       $w = -we^{k_{\partial\Omega}l}$ ;
17       $\vec{x} = \vec{x} + (l - l')\vec{u}$ ;
18       $t = t + t_{l-l'}$ ;
19  else
20    Coll_Null = .true.;
21    while  $t > t_I$  et Coll_Null do
22      Échantillonner  $l'$  suivant la loi de  $\mathcal{L}$ ;
23       $t' = l'/c$ ;
24      if  $l' > l$  then
25        if  $t_I > t - t_l$  then
26           $w = wT_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u})$ ;
27           $t = t_I$ ;
28        else
29           $w = wT_{\partial\Omega}(\vec{y}, t - t_l)$ ;
30          Sortie = .true.;
31          Coll_Null = .false.;
32      else
33        if  $t_I > t - t_l$  then
34           $w = wT_I(\vec{x} - c(t - t_I)\vec{u})$ ;
35           $t = t_I$ , Sortie = .true., Coll_Null = .false.;
36        else
37           $\vec{x} = \vec{x} - l'\vec{u}$ ;
38          Échantillonner  $r$  suivant une loi uniforme  $\mathcal{U}([0, 1])$ ;
39          if  $r < \lambda_{min}/\lambda_{max}$  then
40             $w = wF_{\Theta_n}(\vec{x}, t - t')$ ;
41            Coll_Null = .false.;
42          else
43            Échantillonner une réalisation  $\theta_{n-1}$  de  $F_{\Theta_{n-1}}(\vec{x}, t - t')$ ;
44            if  $r < \lambda_{min}/\lambda(\theta_{n-1})$  then
45               $w = wF_{\Theta_n}(\vec{x}, t - t')$ ;
46              Coll_Null = .false.;
47            else
48               $t = t - t'$ ;

```

Annexe L

Une reformulation en rayonnement σT^4

Voici une deuxième façon d'obtenir la formulation intégrale présentée dans la section [7.2](#). Elle est obtenue à partir de l'équation [\(4.50\)](#) établie dans la section [4.3](#), page [130](#). Une fois de plus, nous laissons de côté le transfert convectif, car il n'est en aucun cas source de difficulté

(le transfert étant linéaire).

$$\begin{aligned}
\tilde{T}_b &= \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma (p_b \tilde{T}_b + p_\delta \tilde{T}_\delta + p_R \tilde{T}_\gamma) \\
&= \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(\frac{\lambda/\delta}{\hat{k}} \tilde{T}_\delta + \sigma \frac{\tilde{T}_\gamma^3 + \tilde{T}_\gamma^2 \tilde{T}_b + \tilde{T}_\gamma \tilde{T}_b^2 + \tilde{T}_b^3}{\hat{k}} (\tilde{T}_\gamma - \tilde{T}_b) + \frac{4\sigma T_{max}^3}{\hat{k}} \tilde{T}_b \right) \\
&= \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(\frac{\lambda/\delta}{\hat{k}} \tilde{T}_\delta + \sigma \frac{\tilde{T}_\gamma^4 - \tilde{T}_b^4}{\hat{k}} + \frac{4\sigma T_{max}^3}{\hat{k}} \tilde{T}_b \right) \\
&= \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(\frac{\lambda/\delta}{\hat{k}} \tilde{T}_\delta + \sigma \frac{\tilde{T}_\gamma^4 + \begin{pmatrix} -\tilde{T}_b T_{max}^3 + \tilde{T}_b T_{max}^3 \\ -\tilde{T}_b^2 T_{max}^2 + \tilde{T}_b^2 T_{max}^2 \\ -\tilde{T}_b^3 T_{max} + \tilde{T}_b^3 T_{max} \end{pmatrix} - \tilde{T}_b^4}{\hat{k}} + \frac{4\sigma T_{max}^3}{\hat{k}} \tilde{T}_b \right) \\
&= \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(\frac{\lambda/\delta}{\hat{k}} \tilde{T}_\delta + \frac{\sigma T_{max}^3}{\hat{k}} \left(\frac{\tilde{T}_\gamma^4}{T_{max}^3} + 3 \left(\frac{\tilde{T}_b}{T_{max}} T_{max} + \left(1 - \frac{\tilde{T}_b}{T_{max}} \right) \left(\frac{\tilde{T}_b T_{max}^3 + \tilde{T}_b^2 T_{max}^2 + \tilde{T}_b^3 T_{max}}{3T_{max}^3} \right) \right) \right) \right) \\
&= \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(\frac{\lambda/\delta}{\hat{k}} \tilde{T}_\delta + \frac{\sigma T_{max}^3}{\hat{k}} \frac{\tilde{T}_\gamma^4}{T_{max}^3} + \frac{3\sigma T_{max}^3}{\hat{k}} \left(\frac{\tilde{T}_b}{T_{max}} T_{max} + \left(1 - \frac{\tilde{T}_b}{T_{max}} \right) \left(\frac{\tilde{T}_b T_{max}^3 + \tilde{T}_b^2 T_{max}^2 + \tilde{T}_b^3 T_{max}}{3T_{max}^3} \right) \right) \right) \tag{L.1}
\end{aligned}$$

que l'on réécrit,

$$\tilde{T}_b = \int_{\mathcal{D}_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \left(\begin{array}{l} p_C \tilde{T}_\delta \\ + p_R \frac{\tilde{T}_\gamma^4}{T_{max}^4} T_{max} \\ + (1 - p_C - p_R) \left(\begin{array}{l} \frac{\tilde{T}_b}{T_{max}} T_{max} \\ + \left(1 - \frac{\tilde{T}_b}{T_{max}} \right) \left(\begin{array}{l} \frac{\tilde{T}_b/T_{max}}{3} T_{max} \\ + \frac{1 - \tilde{T}_b/T_{max}}{3} 0 \\ + \frac{2}{3} \left(\begin{array}{l} \frac{\tilde{T}_b^2/T_{max}^2}{2} T_{max} \\ + \frac{1 - \tilde{T}_b^2/T_{max}^2}{2} 0 \\ + \frac{1}{2} \frac{\tilde{T}_b^3}{T_{max}^3} T_{max} \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right) \end{array} \right) \quad (\text{L.2})$$

où $\hat{k} = 4\sigma T_{max}^3 + \lambda/\delta$, $p_C = \lambda/\delta\hat{k}$ et $p_R = \sigma T_{max}^3/\hat{k}$.

On retrouve ainsi une formulation intégrale équivalente à celle établie dans la section 7.2.

Table des figures

1.1	Illustrations de représentations numérisées de type CAO.	6
1.2	Illustration d'une géométrie complexe.	7
1.3	Illustration du principe de modèle réduit.	8
1.4	Illustration de la notion de lancer de rayon et de grille accélératrice.	10
1.5	Dépendance du temps de calcul d'un rendu au raffinement de la donnée géométrique surfacique.	11
1.6	Dépendance du temps de calcul d'un rendu au raffinement de la donnée paramétrique volumique dans les nuages	12
1.7	Illustration d'un chemin conducto-radiatif dans un moteur	12
1.8	Illustration d'une simulation réalisée à partir de la méthode DSMC.	13
2.1	Profil de la densité de probabilité d'une loi normale.	26
3.1	Illustration d'une configuration conducto-convecto-radiative.	37
3.2	Illustration d'un milieu poreux de type cellule de Kelvin	38
3.3	Illustration d'une puce électronique	38
3.4	Illustration d'une centrale solaire	39
3.5	Illustration de la propagation de l'information via G	46
3.6	Illustration de trois réalisations selon Θ_{F_i}	53
3.7	Illustration de quatre réalisations selon Θ_S	58
3.8	Illustration de la densité de présence (non normalisée) d'un processus diffusif dans un milieu semi-infini.	59
3.9	Walk-on-Sphere	60
3.10	Walk-on-parallépipède-rectangle	62
3.11	Représentation de trois réalisations de Θ_R	66
3.12	Représentation de l'échantillonnage d'une contribution en rayonnement.	67
3.13	Illustration d'une réalisation selon Θ	72
3.14	Illustration d'un MB	75
3.15	Lien entre processus stochastique et fonction de Green.	76
3.16	Lien entre processus stochastique et fonction de Green en milieu confiné.	77
3.17	Illustration de quatre trajectoires associées au processus conductif.	80
3.18	Illustration d'une réalisation selon la méthode de Green et d'une trajectoire selon les PS.	81
3.19	Champs de température T_S solution de (3.66).	86
3.20	<i>Marche sur δ-sphere</i>	91
3.21	Mise en oeuvre dans un problème conducto-convectif de la marche sur δ -sphere.	93
3.22	Illustration des trois points de vue d'une propagation.	95
3.23	Illustration d'un milieu poreux de type cellule de Kelvin et d'un chemin conductif	96

3.24	Illustration d'une puce électronique et d'une trajectoire.	96
3.25	Illustration d'une centrale solaire et d'un ensemble de chemins optiques . . .	97
3.26	Insensibilité à la complexité géométrique en thermique linéaire.	98
4.1	Technique des ACN.	104
4.2	Quatre exemples de systèmes complexes non-linéaires (source [13])	109
4.1	Quatre exemples de systèmes complexes non-linéaires.	110
4.2	Deux résultats en génie des procédés.	111
4.3	Représentation de la trajectoire d'une particule dans un milieu hétérogène. .	114
4.4	Idée de branchements.	114
4.5	Relaxation de la distribution de vitesse à l'équilibre	116
4.6	Résultats associés à l'équation de Boltzmann non-linéaire.	117
4.7	Illustration d'une trajectoire conductive en thermique non-linéaire $\lambda(T)$	129
4.8	Illustration associée au rayonnement non-linéaire σT^4	136
4.9	Une conséquence de la non-linéarité en rayonnement.	138
5.1	Résultats MCP dans une configuration académique.	151
5.2	Représentation de la configuration Cube.	154
5.3	Résultats obtenus dans la configuration Cube sous l'hypothèse corps mince. .	156
5.4	Résultats obtenus dans la configuration Cube, en prenant en compte les trois transferts de chaleur conductif, convectif et radiatif.	158
5.5	Résultats obtenus dans la configuration Cube au stationnaire, en prenant en compte seulement les transferts de chaleur radiatif et conductif.	159
5.6	Représentation de la configuration Double Slab	160
5.7	Illustrations schématique de la configuration Double-Slab.	161
5.8	Résultat de l'influence des paramètres p, ς, ψ	163
5.9	Comportement asymétrique en température.	164
5.10	Evolution du temps de calcul en fonction des paramètres p, ς et ψ	165
5.11	Technique de réduction de variance.	168
5.12	Résultats double-slab 1	169
5.13	Résultats double-slab 2	169
5.14	Résultats double-slab 3	169
5.15	Passage à l'échelle : Résultats obtenus dans la géométrie Stanford Bunny	
1.1a	en prenant en compte les trois transferts.	170
5.16	Passage à l'échelle : Résultats obtenus dans la géométrie Stanford Bunny	
1.1a	en prenant en compte les transferts conducto-radiatif.	171
5.17	Passage à l'échelle : Résultats obtenus dans la géométrie Stanford Bunny	
1.1a	en prenant en compte les transferts conducto-radiatif au stationnaire. .	171
5.18	Résultats du MCP pour un transfert thermique instationnaire purement conductif dans un milieu infini de dimension deux.	174
5.19	Gestion de la frontière avec la stratégie naïve	176
5.20	Gestion de la frontière avec la stratégie de Milnes	180
5.21	Illustration d'une marche conductive en $\lambda(T)$ en présence d'une frontière. . .	181
5.22	Problème associé à la stratégie de Milnes.	182
5.23	Résultats du MCP pour un transfert thermique stationnaire purement conductif dans un mur.	184
5.24	Influence de la probabilité de rejet p sur la longueur de collision.	185

5.25	Influence du nombre de branches générées en fonction du libre parcours moyen δ_{me} .	186
5.26	Influence du rapport $\lambda_{min}/\lambda_{max}$ sur le nombre de branches générées.	187
5.27	Résultats du MCP pour un problème de transfert thermique stationnaire purement conductif dans un mur.	188
5.28	Profil de la température stationnaire.	189
5.29	Résultats du MCP pour un problème de transfert thermique stationnaire purement conductif dans un carré.	190
7.1	Cavité où la température est imposée aux parois rouge à $T_{\partial\Omega_D}$, les autres parois sont adiabatiques.	200
7.2	Chaîne de Markov associée au polynôme.	204
7.3	Résultats obtenus dans la géométrie Stanford Bunny 1.1a, en prenant en compte les transferts de chaleur conductif et radiatif en instationnaire. Algorithme σT^4 exact.	206
H.1	Comparaison des marches macro et méso en milieu infini, en instationnaire.	291
H.2	Dispersion des marches méso, macro et gaussienne.	293
J.1	Evolution des températures T et T_L en rayonnement σT^4 .	299
J.2	Evolution de l'erreur relative $(T_{Lstat} - T_{stat})/\Delta T$ en fonction du paramètre ϵ .	300
J.3	Résultats obtenus dans la configuration 5.2.	301
J.4	Résultats obtenus dans la configuration 5.2.	302
J.5	Résultats obtenus dans la configuration 5.2.	303
J.6	Evolution de l'erreur relative $(T_{nstat} - T_{stat})/T_{stat}$ en fonction du paramètre ϵ .	304

Liste des Algorithmes

1	Fonction F_m d'échantillonnage de m	22
2	Fonction d'échantillonnage de la transmitivité t d'une couche	29
3	Echantillonnage de \mathcal{F} à la position \vec{x} à l'instant t	48
4	Mise en oeuvre de la méthode des fonctions de Green.	49
5	Algorithme associé à Θ_{F_i}	52
6	Algorithme associé à Θ_S	57
7	Algorithme associé à Θ_R	65
8	Algorithme associé à Θ	71
9	Algorithme δ-sphere en milieu infini sans couplage	88
10	Algorithme δ-sphere en milieu infini avec couplage radiatif	89
11	Algorithme δ-sphere en géométrie confinée	92
12	Exemple sans ACN.	102
13	Exemple avec ACN.	103
14	Algorithme selon la proposition de J. Dauchet.	108
15	Algorithme selon la proposition de G. Terrée.	119
16	Algorithme de la combinaison des trois MCNL.	122
17	Algorithme en $\lambda(T)$ selon la v.a Θ	127
18	Algorithme en $\lambda(T)$ selon la v.a $\mathcal{F}_{\vec{u}}$	127
19	Algorithme en σT^4 selon la v.a Θ	134
20	Algorithme en σT^4 selon la v.a Θ_b	135
21	Algorithme unifié	143
22	Algorithme de Monte-Carlo Picard (MCP).	150
23	Algorithme de MCP en σT^4	306
24	Algorithme en $h_F(T)$ selon la v.a Θ	309
25	Algorithme en $h_F(T)$ selon la v.a Θ_b	309
26	Algorithme en $C(T)$	310
27	Algorithme MCP en $\lambda(T)$ selon la v.a Θ_n	311
28	Algorithme MCP en $\lambda(T)$ avec frontières.	316

Liste des symboles

$\bar{\Omega}$	$\Omega \cup \partial\Omega$ l'adhérence du domaine Ω
\vec{j}	le vecteur densité surfacique de flux
\vec{u}	une direction
\vec{x}	une position à l'intérieur de Ω
\vec{y}	une position sur la frontière $\partial\Omega$
δ	est soit la distribution de Dirac en 0, soit la longueur du pas utilisé dans la marche sur δ -sphere
λ	la conductivité thermique
\mathbb{E}_X	l'espérance associée à la v.a X
\mathbb{S}^2	la sphère en dimension 3
\mathbb{S}_+^2	l'hémisphère entrant au domaine
ν	une fréquence
Ω	un domaine quelconque
Ω_S	le domaine solide
Ω_{F^∞}	la cavité fluide englobante
Ω_{F_i}	la i ème cavité fluide
$\overset{\circ}{\Omega}$	signifie l'intérieur du domaine Ω
$\partial\Omega$	la frontière du domaine Ω
$\partial\Omega_R$	frontière englobant la totalité du système
$\partial\Omega_J^D = \partial\Omega_J \setminus \partial\Omega_D$	la frontière $\partial\Omega_J$ privée de la frontière $\partial\Omega_D$
ρ	la densité massique
σ	la constante de Stefan-Boltzmann
Θ_F	la v.a associée à la température du fluide T_F
Θ_R	la v.a associée à la température radiative T_R
Θ_S	la v.a associée à la température du solide T_S
ζ	le coefficient de transfert de chaleur radiatif linéarisé

C	la capacité calorifique
G	la fonction de Green
G_F	la fonction de Green associée à la convection
G_S	la fonction de Green associée à la conduction
h_F	le coefficient d'échange convectif
k_a	le coefficient d'absorption
$k_e = k_a + k_s$	le coefficient d'extinction
k_s	le coefficient de diffusion
p_S	la fonction de phase
T	la température
T_D	la température imposée à la frontière de Dirichlet $\partial\Omega_D$
T_F	la température du fluide (uniforme)
T_I	la température de la condition initiale
T_R	la température radiative
T_S	la température en un point du solide, à un certain instant
$T_{R\vec{u}}^\nu$	la température de radiance dans la direction \vec{u} , à la fréquence ν
T_{ref}	la température de référence
\mathcal{S}_F	la surface de la cavité Ω_F
\mathcal{V}_F	le volume de la cavité Ω_F

Bibliographie

- [1] The stanford 3d scanning repository. <http://graphics.stanford.edu/data/3Dscanrep/>.
- [2] High-tune : Starter pack. <https://www.meso-star.com/projects/high-tune/starter-pack.html>.
- [3] Najda Villefranque, Richard Fournier, Fleur Couvreur, Stéphane Blanco, Céline Cornet, Vincent Eymet, Vincent Forest, and Jean-Marc Tregan. A path-tracing monte carlo library for 3-d radiative transfer in highly resolved cloudy atmospheres. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 11(8) :2449–2473, 2019.
- [4] Yu M Tsirkunov and DA Romanyuk. Computational fluid dynamics/monte carlo simulation of dusty gas flow in a “rotor-stator” set of airfoil cascades. *Progress in Propulsion Physics*, 8 :427–444, 2016.
- [5] John H Curtiss. “monte carlo” methods for the iteration of linear operators. *Journal of Mathematics and Physics*, 32(1-4) :209–232, 1953.
- [6] MH Kalos and PA Whitlock. Monte carlo methods, second, revised and enlarged, 2008.
- [7] Kausik Chatterjee, John R Roadcap, and Surendra Singh. A new green’s function monte carlo algorithm for the solution of the two-dimensional nonlinear poisson–boltzmann equation : Application to the modeling of the communication breakdown problem in space vehicles during re-entry. *Journal of Computational Physics*, 276 :479–485, 2014.
- [8] Ivan Dimov and Todor Gurov. Monte carlo algorithm for solving integral equations with polynomial non-linearity. parallel implementation. *Pliska Studia Mathematica Bulgarica*, 13(1) :117p–132p, 2000.
- [9] Ivan T Dimov. *Monte Carlo methods for applied scientists*. World Scientific, 2008.
- [10] Mathieu Galtier, Stéphane Blanco, Jérémie Dauchet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Richard Fournier, Maxime Roger, Christophe Spiesser, and Guillaume Terrée. Radiative transfer and spectroscopic databases : A line-sampling monte carlo approach. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 172 :83–97, 2016.
- [11] Jérémie Dauchet, Stéphane Blanco, Jean-François Cornet, and Richard Fournier. Calculation of the radiative properties of photosynthetic microorganisms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 161 :60–84, 2015.

- [12] Guillaume Terrée, Stéphane Blanco, Mouna El Hafi, Richard Fournier, and Julien Yves Rolland. Diffusion approximation and short-path statistics at low to intermediate knudsen numbers. *EPL (Europhysics Letters)*, 110(2) :20007, 2015.
- [13] Jeremi Dauchet, Jean-Jacques Bézian, Stephane Blanco, Cyril Caliot, Julien Charon, Christophe Coustet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Olivier Farges, Vincent Forest, et al. Addressing nonlinearities in monte carlo. *Scientific reports*, 8(1) :13302, 2018.
- [14] Mathieu Galtier, Stéphane Blanco, Cyril Caliot, Christophe Coustet, Jérémie Dauchet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Richard Fournier, Jacques Gautrais, Anaïs Khuong, et al. Integral formulation of null-collision monte carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 125 :57–68, 2013.
- [15] Jérémie Dauchet, Stéphane Blanco, Jean-François Cornet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, and Richard Fournier. The practice of recent radiative transfer monte carlo advances and its contribution to the field of microorganisms cultivation in photobioreactors. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 128 :52–59, 2013.
- [16] Julien Charon, Stephane Blanco, Jean-Francois Cornet, Jeremi Dauchet, Mouna El Hafi, Richard Fournier, Mira Kaissar Abboud, and Sebastian Weitz. Monte carlo implementation of schiff s approximation for estimating radiative properties of homogeneous, simple-shaped and optically soft particles : Application to photosynthetic micro-organisms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 172 :3–23, 2016.
- [17] Guillaume Terrée, Mouna El Hafi, Stéphane Blanco, Richard Fournier, Jérémie Dauchet, and Jacques Gautrais. Addressing the gas kinetics boltzmann equation with branching paths statistics. *arXiv preprint arXiv :1712.02900*, 2017.
- [18] Peter Kutz, Ralf Habel, Yining Karl Li, and Jan Novák. Spectral and decomposition tracking for rendering heterogeneous volumes. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 36(4) :111, 2017.
- [19] Jan Novák, Iliyan Georgiev, Johannes Hanika, and Wojciech Jarosz. Monte carlo methods for volumetric light transport simulation. In *Computer Graphics Forum*, volume 37, pages 551–576. Wiley Online Library, 2018.
- [20] Guillaume Terrée. *Méthode de Monte-Carlo et non-linéarités : de la physique du transfert radiatif à la cinétique des gaz*. PhD thesis, Ecole nationale des Mines d’Albi-Carmaux, 2015.
- [21] Meso-star platform. <https://www.meso-star.com/fr/>.
- [22] Edstar platform demonstrator. http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/prod/fr/.
- [23] Meso-star stardis. <https://www.meso-star.com/projects/stardis/stardis.html>.
- [24] Nicholas Metropolis and Stanislaw Ulam. The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, 44(247) :335–341, 1949.

- [25] W Reihner. Hammersley, jm, dc handscomb : Monte carlo methods. methuen & co., london, and john wiley & sons, new york, 1964. vii+ 178 s., preis : 25 s. *Biometrische Zeitschrift*, 8(3) :209–209, 1966.
- [26] J Shultis and W Dunn. Exploring monte carlo methods, 2012.
- [27] Philippe Barbe and Michel Ledoux. *Probabilité (L3M1)*. EDP Sciences, 2012.
- [28] Walter Appel. *Probabilités pour les non-probabilistes*. H & K, 2015.
- [29] Irina Shevtsova. On the absolute constants in the berry-esseen type inequalities for identically distributed summands. *arXiv preprint arXiv :1111.6554*, 2011.
- [30] Jérémie Delatorre, Germain Baud, Jean-Jacques Bézian, Stéphane Blanco, Cyril Caliot, Jean-François Cornet, Christophe Coustet, Jérémie Dauchet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, et al. Monte carlo advances and concentrated solar applications. *Solar Energy*, 103 :653–681, 2014.
- [31] Léa Penazzi, Stephane Blanco, Cyril Caliot, C Coustet, Mouna El Hafi, R Fournier, Mathieu Galtier, Loris Ibarrart, and Maxime Roger. Toward the use of symbolic monte carlo for conduction-radiation coupling in complex geometries. In *Proceedings of the 9th International Symposium on Radiative Transfer, RAD-19*. Begel House Inc., 2019.
- [32] M Galtier, Maxime Roger, Frédéric André, and Agnès Delmas. A symbolic approach for the identification of radiative properties. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 196 :130–141, 2017.
- [33] Yassine Maanane, Maxime Roger, Agnès Delmas, Mathieu Galtier, and Frédéric André. Symbolic monte carlo method applied to the identification of radiative properties of a heterogeneous material. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, page 107019, 2020.
- [34] Maxime Roger, Mouna El Hafi, Richard Fournier, Stephane Blanco, A De Lataillade, Vincent Eymet, and Patrice Perez. Applications of sensitivity estimations by monte carlo methods. In *RADIATIVE TRANSFER-IV. Fourth International Symposium on Radiative Transfer*. Begel House Inc., 2004.
- [35] Maxime Roger. *Modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de Monte-Carlo : illustrations en transfert radiatif*. PhD thesis, 2006.
- [36] P Lapeyre, Stephane Blanco, C Caliot, J Dauchet, Mouna El Hafi, R Fournier, Olivier Farges, Jacques Gautrais, and Maxime Roger. Monte-carlo and sensitivity transport models for domain deformation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 251 :107022, 2020.
- [37] Alastuey Angel, Marc Magro, and Pierre Pujol. *Physique et outils mathématiques méthodes et exemples : méthodes et exemples*. EDP Sciences, 2012.
- [38] Ivar Stakgold and Michael J Holst. *Green's functions and boundary value problems*, volume 99. John Wiley & Sons, 2011.

- [39] James V Beck, Kevin D Cole, A Haji-Sheikh, and Bahman Litkouhl. *Heat conduction using Green's function*. Taylor & Francis, 1992.
- [40] Dean G Duffy. *Green's functions with applications*. CRC Press, 2015.
- [41] Durbin. The First-Passage Density of a Continuous Gaussian Process to a General Boundary Author (s) : J . Durbin Source : Journal of Applied Probability , Vo. 22(1) :99–122, 1985.
- [42] Paavo Salminen. On the First Hitting Time and the Last Exit Time for a Brownian Motion to / from a Moving Boundary Author (s) : Paavo Salminen Source : Advances in Applied Probability , Vol . 20 , No . 2 (Jun ., 1988), pp . 411-426 Published by : Applied Probability T. 20(2) :411–426, 1988.
- [43] Durbin. The First-Passage Density of the Brownian Motion Process to a Curved Boundary Author (s) : J . Durbin and D . Williams Source : Journal of Applied Probability , Vol . 29 , No . 2 (Jun ., 1992), pp . 291-304 Published by : Applied Probability Trust Stab. 29(2) :291–304, 1992.
- [44] Sidney Redner. *A guide to first-passage processes*. Cambridge University Press, 2001.
- [45] Ricciardi Nardo, Nobile, Pirozzi. FIRST-PASSAGE-TIME PROBLEMS FOR GAUSS – MARKOV PROCESSES. 482 :453–482, 2001.
- [46] Amelia G Nobile, Enrica Pirozzi, and Luigi M Ricciardi. FOR A CLASS OF MARKOV PROCESSES. pages 933–954, 2006.
- [47] Amelia G Nobile, Enrica Pirozzi, and Luigi M Ricciardi. ASYMPTOTICS AND EVALUATIONS OF FPT DENSITIES THROUGH VARYING BOUNDARIES FOR GAUSS-MARKOV PROCESSES Amelia G. Nobile, Enrica Pirozzi, Luigi M. Ricciardi Received February 14, 2008. 1(ii)Nobile, A. G., Pirozzi, E., & Ricciardi, L. M. (2008). ASYMPTOTICS AND EVALUATIONS OF FPT DENSITIES THROUGH VARYING BOUNDARIES FOR GAUSS-MARKOV PROCESSES Amelia G. Nobile, Enrica Pirozzi, Luigi M. Ricciardi Received February 14, 2008, 1(ii), 157–182.) :157–182, 2008.
- [48] Mario Abundo. On the excursions of drifted Brownian motion and the successive passage times of Brownian motion arXiv : 1604 . 01172v1 [math . PR] 5 Apr 2016. pages 1–11, 2016.
- [49] Haji Sheikh. THE FLOATING RANDOM WALK AND ITS APPLICATION TO. (2), 1966.
- [50] S Torquato, I Kim, and D Cule. Effective conductivity, dielectric constant, and diffusion coefficient of digitized composite media *Journal of Applied Physics*, 85(3) :1560–1571, 1999.
- [51] Milstein and Tretyakov. Simulation of a Space-Time Bounded Diffusion Author (s) : G . N . Milstein and M . V . Tretyakov Source : The Annals of Applied Probability , Vol . 9 , No . 3 (Aug ., 1999), pp . 732-779 Published by : Institute of Mathematical Statistics Stable URL : . 9(3) :732–779, 1999.

- [52] Madalina Deaconu and Antoine Lejay. A random walk on rectangles algorithm. *Methodology and Computing in Applied Probability*, 8(1) :135–151, 2006.
- [53] Madalina Deaconu and Antoine Lejay. Simulation of exit times and positions for Brownian motions and Diffusions. *Hal*, 7(1) :1081401–1081402, 2007.
- [54] Madalina Deaconu. Processus stochastiques associés aux équations d ’ évolution linéaires ou non-linéaires et méthodes numériques probabilistes Madalina Deaconu To cite this version : HAL Id : tel-00590778 Processus stochastiques associés aux équations d ’ évolution linéair. 2008.
- [55] Madalina Deaconu and Antoine Lejay. Simulation of a diffusion process by using the importance sampling paradigm To cite this version : HAL Id : inria-00126339 Simulation of a diffusion process by using the importance sampling paradigm. 2009.
- [56] Jorge M. Ramirez, Enrique A. Thomann, and Edward C. Waymire. Advection–Dispersion Across Interfaces. *Statistical Science*, 28(4) :487–509, 2013.
- [57] Antoine Lejay and Sylvain Maire. New Monte Carlo schemes for simulating diffusions in discontinuous media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 245(1) :97–116, 2013.
- [58] Antoine Lejay. The snapping out Brownian motion. 2015.
- [59] Bernard Lapeyre, Étienne Pardoux, Etienne Pardoux, and Rémi Sentis. *Introduction to Monte Carlo methods for transport and diffusion equations*, volume 6. Oxford University Press on Demand, 2003.
- [60] Loris Ibarrart, Cyril Caliot, M El Hafi, R Fournier, S Blanco, S Dutour, J Dauchet, J-M Tregan, V Eymet, and V Forest. Combined conductive-convective-radiative heat transfer in complex geometry using the monte carlo method : Application to solar receivers. In *International Heat Transfer Conference Digital Library*. Begel House Inc., 2018.
- [61] Loris Ibarrart, Stephane Blanco, C Caliot, Mouna El-Hafi, Fournier Richard, and Léa Penazzi. Couplage conducto-convecto-radiatif par échantillonnage de chemins : un parallèle avec les chemins de multi-diffusions en transfert radiatif. In *SFT 2019-27ème Congrès Français de Thermique*, pages p–239, 2019.
- [62] Jérémie De la Torre. *Calculs de sensibilités par méthode de Monte-Carlo, pour la conception de procédés à énergie solaire concentrée*. PhD thesis, 2011.
- [63] Olivier Faure. Ecole Nationale Des Ponts Et Chaussees. 3797(August), 1992.
- [64] Denis S Grebenkov. Partially reflected brownian motion : A stochastic approach to transport phenomena. *Focus on probability theory*, pages 135–169, 2006.
- [65] Marios M Fyrillas and Keiko K Nomura. Diffusion and brownian motion in lagrangian coordinates. *The Journal of chemical physics*, 126(16) :164510, 2007.
- [66] Rakhi Dhuriya, Varun Dalia, and P Sunthar. Diffusiophoretic enhancement of mass transfer by nanofluids. *Chemical Engineering Science*, 176 :632–640, 2018.

- [67] Kenneth M Case and Paul Frederick Zweifel. Linear transport theory. 1967.
- [68] Subrahmanyan Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Courier Corporation, 2013.
- [69] J-M Tregan, Stephane Blanco, Jérémi Dauchet, Mouna El Hafi, R Fournier, L Ibarrart, P Lapeyre, and N Villefranque. Convergence issues in derivatives of monte carlo null-collision integral formulations : a solution. *Journal of Computational Physics*, page 109463, 2020.
- [70] Richard Courant, Kurt Friedrichs, and Hans Lewy. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen*, 100(1) :32–74, 1928.
- [71] Mark Kac et al. On some connections between probability theory and differential and integral equations. In *Proceedings of the second Berkeley symposium on mathematical statistics and probability*. The Regents of the University of California, 1951.
- [72] Sylvain Condamin. *Temps de premier passage en milieu confiné : du mouvement Brownien à la sous-diffusion*. PhD thesis, UNIVERSITÉ PARIS VI, 2007.
- [73] Thibaut Calandre. *Optimisation d’observables de premier passage pour des processus de diffusion intermittents confinés*. PhD thesis, Paris 6, 2014.
- [74] Meso-star solstice : The solar plant simulation tool. <https://www.meso-star.com/projects/solstice/solstice.html>.
- [75] Star-4v/s : evaluates an invariant property of diffuse random walks. https://gitlab.com/meso-star/star-4v_s.
- [76] Mathieu Galtier. *Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l’échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives*. PhD thesis, Ecole nationale des Mines d’Albi-Carmaux, 2014.
- [77] Vincent Eymet, Damien Poitou, Mathieu Galtier, Mouna El Hafi, Guillaume Terrée, and Richard Fournier. Null-collision meshless monte-carlo—application to the validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 129 :145–157, 2013.
- [78] Jérémi Dauchet. *Analyse radiative des photobioréacteurs*. PhD thesis, 2012.
- [79] HR Skullerud. The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 1(11) :1567, 1968.
- [80] SL Lin and JN Bardsley. Monte carlo simulation of ion motion in drift tubes. *The Journal of Chemical Physics*, 66(2) :435–445, 1977.
- [81] SL Lin and JN Bardsley. The null-event method in computer simulation. *Computer Physics Communications*, 15(3-4) :161–163, 1978.
- [82] Jean-Pierre Boeuf and E Marode. A monte carlo analysis of an electron swarm in a nonuniform field : the cathode region of a glow discharge in helium. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 15(11) :2169, 1982.

- [83] D Heifetz, D Post, M Petravac, J Weisheit, and G Bateman. A monte-carlo model of neutral-particle transport in diverted plasmas. *Journal of Computational Physics*, 46(2) :309–327, 1982.
- [84] Michael J Brennan. Optimization of monte carlo codes using null collision techniques for experimental simulation at low e/n . *IEEE transactions on plasma science*, 19(2) :256–261, 1991.
- [85] Savino Longo. Direct derivation of skullerud’s monte carlo method for charged particle transport from the linear boltzmann equation. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 313(3-4) :389–396, 2002.
- [86] Savino Longo and P Diomede. Monte carlo modeling of gas phase ion transport under thermal gradients and external fields. *The European Physical Journal Applied Physics*, 26(3) :177–185, 2004.
- [87] Julien-Yves Rolland. *Etude statistique des chemins de premier retour aux nombres de Knudsen intermédiaires : De la simulation par méthode de Monte Carlo à l’utilisation de l’approximation de diffusion*. PhD thesis, 2009.
- [88] François Rouvière. Petit guide de calcul différentiel à l’usage de la licence et de l’agrégation. deuxième édition revue et commentée. 2009.
- [89] Code image thermique (mésostar). https://gitlab.com/jeanmarc.tregan/ray_t4.
- [90] Claude Bardos, Russel E Caflisch, and Basil Nicolaenko. The milne and kramers problems for the boltzmann equation of a hard sphere gas. *Communications on pure and applied mathematics*, 39(3) :323–352, 1986.
- [91] Frédéric Poupaud. Diffusion approximation of the linear semiconductor boltzmann equation : analysis of boundary layers. *Asymptotic analysis*, 4(4) :293–317, 1991.
- [92] John R Howell, M Pinar Menguc, and Robert Siegel. *Thermal radiation heat transfer*. CRC press, 2010.
- [93] Fatmir Asllanaj. *Étude et analyse numérique des transferts de chaleur couplés par rayonnement et conduction dans les milieux semi-transparentes : application aux milieux fibreux*. PhD thesis, Université Henri Poincaré-Nancy 1, 2001.
- [94] Kevin R Bagnall, Yuri S Muzychka, and Evelyn N Wang. Application of the kirchhoff transform to thermal spreading problems with convection boundary conditions. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 4(3) :408–420, 2013.
- [95] Mouna El-Hafi, Stephane Blanco, Jeremi Dauchet, Mathieu Galtier, Richard Fournier, Jean-Marc Tregan, and Najda Villefranque. Three viewpoints on null-collision monte carlo algorithms. In *CTRPM-VI-6th Computational Thermal Radiation in Participating Media VI*, pages 8–p, 2018.