Monte Carlo Transfert radiatif

Starwest

12 juin 2014

 $\mathbf{2}$

Table des matières

Ι	Initiation	7
1	Introduction	9
2	Introduction à la modélisation statistique du transport de photons (rappel du cours de transfert radiatif)	t 13
3	Algorithmes de Monte Carlo analogues (exemples) 3.1 Notations et présentation algorithmique 3.2 Exemples sans diffusion et sans réflexion 3.3 Exemples avec diffusion 3.4 Exemples avec poids variables 3.5 Exemples d'intégration fréquentielle	17 17 18 21 26 26
4 5	Optimisation d'un algorithme analogue 4.1 Echantillonnage par importance 4.2 Variables de contrôle 4.3 Reformulation intégrale Mise en oeuvre	 29 29 29 29 31
II	Approfondissements	33
6	Formulation intégrale 6.1 Rappels de probabilité 6.2 Traduction systématique d'un algorithme en une formulation intégrale : validation d'un algorithme analogue 6.3 Passage d'une formulation intégrale à un algorithme : conception d'algorithmes non-analogues	35 35 35 35
7	Techniques d'analyse 7.1 Calculs de sensibilité 7.2 Algorithmes à variance nulle	37 37 37
8	Monte Carlo, un outil didactique	39

TABLE DES MATIÈRES

Préambule

Les origines historiques et les fondements de la méthode de Monte Carlo sont présentés dans de très nombreux et excellents livres d'enseignement ou de recherche. Cette méthode de calcul numérique est en effet l'une des plus anciennes, l'une des plus couramment employées et certainement l'une de celles qui a trouvé des applications concrètes dans les domaines scientifiques les plus divers. Tout a donc été dit et écrit sur la méthode de Monte Carlo dans son acceptation usuelle et nous ne reprendrons pas ici cette description, ou alors lorsque nous la reprendrons ce sera avec un objectif précis et très spécifique et les références bibliographiques ne prétendront jamais à l'exhaustivité.

Nous nous adressons à un lecteur s'intéressant à la physique du rayonnement, en anticipant deux types d'attentes :

- Découvrir la méthode telle qu'elle est employée pratiquement aujourd'hui, étant donnés les librairies informatiques et les calculateurs accessibles : en gros, aller au plus vite vers une utilisation effective de la méthode, sans passer à côté des avancées récentes (algorithmiques et informatiques) lorsque celles-ci ont atteint un niveau de maturité suffisant pour être exploitables par un non-spécialiste.
- Entrer plus avant dans les subtilités de la méthode pour contribuer à en améliorer les performances et permettre sa mise en oeuvre dans de nouveaux contextes.

Le texte qui suit est donc découpé en deux parties qui reflètent ces deux objectifs, à une exception près : le lecteur souhaitant seulement être initié à la méthode, avec un objectif pratique de court terme, est malgré tout invité à lire le premier chapitre de la partie II. Ce n'est en effet qu'à ce stade qu'il pourra acquérir une pratique autonome de la méthode.

Le texte actuel est très incomplet, mais pour chacun des chapitres et paragraphes manquants, nous renverrons le lecteur vers un artcile de synthèse écrit pour la communauté de recherche s'intéressant au rayonnement solaire concentré [1]. Un article similaire est en cours d'écriture qui sera plus orienté vers des applications en combustion.

TABLE DES MATIÈRES

Première partie Initiation

Chapitre 1 Introduction

Malgré la grande diversité et l'ancienneté de ses origines historiques, la méthode de Monte Carlo ne s'est stabilisée et n'a trouvé son nom définitif que dans les années 1940. Elle relève avant tout des mathématiques expérimentales et plus précisément de la partie de ces mathématiques qui s'intéresse aux expériences portant sur des nombres aléatoires. Dans sa phase de développement la plus intense, il s'agissait avant tout de simuler la diffusion aléatoire de neutrons dans un matériau fissile et le phénomène physique étudié portait donc lui même le caractère aléatoire. Dans de nombreux contextes, la méthode de Monte Carlo a donc conservé cette image de l'utilisation d'un calculateur pour la simulation de processus aléatoires. Mais personne n'oublie que la méthode a été employée au XIX^e siècle pour estimer la valeur de π à l'aide d'aiguilles jettées sur une grille, en comptant le nombre d'intersections entre chaque aiguille et la grille. Il y a donc une seconde idée (qui n'a été formalisée complètement qu'en 1948 par Fermi, von Naumann et Ulman) : la méthode de Monte Carlo est aussi un moyen de faire appel à des réalisations aléatoires pour évaluer la solution d'un problème déterministe. Dans le contexte de la physique du rayonnement les deux idées sont présentes au même niveau d'importance. La méthode est en effet perçue aussi bien comme un moyen de simuler les trajectoires aléatoires de photons et un moyen d'accéder au solutions déterministes de l'équation de transfert radiatif.

Indépendamment du contexte applicatif et du type de pratique, les algorithmes de Monte Carlo ont en commun de mettre en oeuvre plusieurs fois (N fois) un même processus aléatoire. Du fait de la composante aléatoire du processus, chaque mise en oeuvre est potentiellement différente de la précédente et la spécificité de chacune est traduite quantitativement par la valeur d'un poids w (on notera \mathcal{D}_W l'ensemble des valeurs possibles de w). On calcule alors la moyenne des poids, soit $m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i$ où w_i est la valeur du poids obtenu lors de la *i*-ème mise en oeuvre, le but étant de s'approcher de la valeur limite que l'on obtiendrait en faisant tendre N vers l'infini. Si on note A la grandeur physique que l'on cherche à évaluer, on parle de *validation* de l'algorithme lorsqu'on est capable de démontrer que $\lim_{N\to+\infty} m = A$ et de *convergence* lorsque N est suffisamment grand pour que |m - A| soit inférieur à la précision souhaitée.

Dans le quatrième exemple du chapitre 3, le processus aléatoire considéré implique l'émission d'un photon depuis une surface noire isotherme S_0 , puis le déplacement de ce photon jusqu'à son éventuel premier impact avec une surface. Le poids est égal à 1 si le photon impacte une surface S_1 donnée et 0 sinon. En faisant la moyenne de N poids ainsi obtenus, si N est suffisamment grand, on estime la fraction des photons émis par S_0 qui rencontrent S_1 , c'est à dire le facteur de forme F_{01} de S_0 vers S_1 . Dans cet exemple,

- $-A = F_{01}$, c'est à dire que la grandeur étudiée est le facteur de forme;
- le poids w prend une valeur dans l'ensemble $\mathcal{D}_W = \{0, 1\},\$
- − la moyenne des poids correspondant à N mises en œuvre indépendantes du processus vérifie bien $\lim_{N\to+\infty} m = F_{01}$ (la validation de l'algorithme ne présente aucune difficulté);
- la question de la convergence reste ouverte : combien de photons faut-il suivre pour garantir que m est une bonne approximation de F_{01} ?

Pour répondre à cette dernière question, on fait appel aux mêmes techniques statistiques que celles employées communément lors de l'évaluation des incertitudes de mesure en physique expérimentale. On calcule notamment la grandeur suivante :

$$s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i^2\right) - m^2}$$

Cette grandeur s'interpréte comme une précision de calcul et le fait d'avoir accès à cette précision, de façon systématique, lors de chaque calcul de type Monte Carlo, est indéniablement l'une des caractéristiques de la méthode qui expliquent son succès. C'est notamment la raison pour laquelle, dans la plupart des exercices d'intercomparaison, les solutions ayant été produites à l'aide d'algorithmes de Monte Carlo sont considérées comme des références. Pourtant ces solutions ne sont pas, a priori, plus précises que celles faisant appel à une quelconque méthode déterministe : pourvu qu'elles s'appuient sur le même modèle physique, elles convergent vers la même valeur, l'une en augmentant le nombre de mises en oeuvres du processus aléatoire, l'autre en aumentant le nombre de points de discrétisation. Mais avec Monte Carlo le calcul est complété d'une valeur d'incertitude et la pratique montre que cette incertitude est fiable dans la grande majorité des cas. On peut en gros retenir que l'incertitude est fiable dès lors qu'elle est en dessous de quelques pourents de la valeur calculée : si s indique que le calcul est imprécis, que l'incertitude relative est de l'ordre de la dizaine de pourcents ou supérieure, alors cette incertitude n'est pas fiable et la véritable erreur de calcul peut être beaucoup plus élevée que celle indiquée, mais si s indique que le calcul est prècis, alors cette précision est fiable. Il est facile d'opposer à de tels raccourcis tout un ensemble de contre-exemples, certains pouvant être effectivement croisés dans le domaine du transfer radiatif. Mais exagérer l'importance de ces exemples pathologiques et présenter comme incontournables les édifices théoriques permettant de les affronter serait en contradiction avec la pratique.

Pour autant, aucune présentation de la méthode de Monte Carlo ne peut manquer de conseiller aux utilisateurs de prendre le temps d'acquérir un minimum de maîtrise des principaux concepts de la théorie statistique. Même en oubliant les situations pathologiques que nous venons de mentionner, c'est la garantie de pratiquer la méthode avec beaucoup plus de sereinité, notamment lorsqu'il est question d'optimisation de convergence. Nous faisons ici le choix de laisser temporairement de côté, jusqu'au chapitre 6, cet édifice théorique. Si nous faisons ce choix c'est que la pratique montre qu'il n'est pas nécessaire de maîtriser les concepts de variable aléatoire, d'espérance et d'estimateur pour concevoir, par exemple, un algorithme qui évalue F_{01} en suivant des photons émis par S_0 et en comptant la fraction qui atteint S_1 . Nous consacrerons un chapitre entier à montrer que de nombreuses grandeurs radiatives peuvent être évaluées de cette façon, sans développement formel, à partir de quelques images simples de la physique du rayonnement. Il s'agit de la famille des algorithmes analogues. En ce qui concerne l'évaluation et l'analyse des transferts radiatifs, l'immense majorité des algorithmes utilisés aujourd'hui appartient à cette famille. On peut donc retenir qu'il est très souvent possible de faire appel à la méthode de Monte Carlo sans disposer d'un quelconque savoir faire dans le domaine des statistiques ... à une exception notable près : même dans les cas les plus simples, il est essentiel d'apprendre à interpréter m comme une réalisation aléatoire unique d'une variable aléatoire M dont l'espérance est égale à la grandeur recherchée : A = E(M).

L'idée correspondante est la suivante. Quand on conçoit un algorithme de Monte Carlo, même si on le conçoit de façon analogue, on manipule deux variables aléatoires qui ont la même espérance : W (le poids) et M (la moyenne de N réalisations indépendantes de W). Si l'algorithme effectue N réalisations indépendantes de W, c'est dans le but d'effectuer une unique réalisation de M. Si on revient à l'exemple du facteur de forme, chaque photon suivi se traduit par une réalisation du poids ($w_i = 1$ ou $w_i = 0$ selon que le *i*-ième photon rencontre ou non la surface S_1) et la moyenne des N poids sert à évaluer le facteur de forme car l'espérance de W est égale F_{01} . Il y a donc bien une première variable aléatoire poids, dont nous avons déjà dit que l'espérance était $E(W) = F_{01}$, mais lorsque nous calculons $m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i$ nous en faisons apparaitre une seconde. En effet, si on relançait le calcul avec N réalisations aléatoires différentes (ce que l'on ne fait jamais, nous verrons ultérieurement pourquoi), on obtiendrait une autre valeur de m, donc une estimation différente du facteur de forme. Le résultat de calcul est aléatoire. On comprend alors pourquoi il y a une parenté forte entre Monte Carlo et mesure expérimentale. Avec cette simple image, on peut donc directement faire appel à la connaissance élementaire que tout scientifique a de la théorie de la mesure pour comprendre comment est utilisée l'incertitude statistique s dans la pratique de Monte Carlo : la mesure M est supposée gaussienne et s est un estimateur de l'écart type de cette gaussienne. Donc lorsque s est fiable (au sens défini ci-dessus) la probabilité d'avoir $A \in [m-2s, m+2s]$ est environ 0.95 et celle d'avoir $A \in [m-3s, m+3s]$ est environ 0.996: le calcul est précis à 2s près dans 95% des cas; il est précis à 3s près dans 99,6% des cas. La pratique est donc communément la suivante :

- 1. On commence par choisir une première valeur de N et on lance un calcul ultilsant N réalisations du poids.
- 2. On regarde si la valeur de l'incertitude statistique s est inférieure ou de l'ordre de 1% de la solution obtenue (typiquement $s \le 0.03 |m|$).
- 3. Si ce n'est pas le cas, la valeur de m n'est pas interprétable et on augmente significativement la valeur de N (au moins d'un facteur 10) et on relance le calcul.
- 4. Si c'est le cas, on sait qu'il est très probable que la solution cherchée soit dans l'intervalle [m 3s, m + 3s] et si ce niveau d'incertitude est compatible avec la précision recherchée, on retient m comme solution approchée.
- 5. Si on souhaite atteindre un niveau de précision supérieur, on augmente la valeur de N pour réduire l'incertitude statistitique. Pour réduire s jusqu'à une valeur objectif s_{obj} , on multiplie N par le facteur $\left(\frac{s}{s_{obj}}\right)^2$ car l'écart type de l'estimateur est proportionnel à $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Il suffit de garder en mémoire cet enchainement pour accéder à un premier niveau de pratique de la méthode et après

un bref rappel de la physique du rayonnement (chapitre 2), c'est donc par ce premier niveau de pratique que nous commencerons, avec une succession d'exemples de mise en oeuvre (chapitre 3). Ces exemples sont pensés comme la trame d'une première séance de travaux pratiques numériques dans le cadre de l'environnement de développement EDStar. Ils serviront également de point de départ pour les travaux de formulation intégrale de la partie II. Tout en restant dans une logique analogue, nous décrirons ensuite les techniques usuelles d'amélioration de convergence (chapitre 4). Leur mise en oeuvre est souvent très simple et dans certains contextes elles peuvent conduire à une réduction de plusieurs ordres de grandeur de l'incertitude statistique. En pratique, pour une puissance de calcul donnée, on peut passer grâce à elles d'un calcul infaisable à un calcul très précis et elles font donc partie des outils incontournables, dès l'initiation. De même, il serait dommage aujourd'hui de découvrir la méthode de Monte Carlo sans avoir connaissance des outils informatiques permettant de simplifier sa mise en oeuvre. Nous ne chercherons pas à recenser l'ensemble de ces outils, mais nous consacrerons un chapitre à décrire ceux qui ont été retenus au sein de l'environnement de développement EDStar (chapitre 5). Cette présentation n'aura donc aucune valeur de généralité, mais elle reflètera ce qu'un utilisateur peut s'attendre à trouver à sa disposition, dans tout contexte de programation où la méthode de Monte Carlo est famillière.

Chapitre 2

Introduction à la modélisation statistique du transport de photons (rappel du cours de transfert radiatif)

Nous nous plaçons en modèle monochromatique (tous les photons ont la même énergie $h\nu$) dans le cadre de validité de l'équation de transfert radiatif usuelle. Cela signifie avant tout que lorsqu'un photon est émis, il se propage en ligne droite (on néglige la réfraction, l'indice est supposé uniforme) jusqu'au prochain évènement de collision :

- collision avec une surface (absorption du photon par la surface ou réflexion et continuation de la trajectoire dans une nouvelle direction), ou
- collision avec la matière constituant le milieu traversé (absorption du photon par un atome, une molécule, une particule, etc, où diffusion et continuation de la trajectoire dans une nouvelle direction).

Nous rappelons les propriétés statistiques correspondantes, en donnant les expressions des probabilités et des densités de probabilités dont nous aurons besoin par la suite, mais sans donner les techniques numériques utilisées communément pour générer des évènements aléatoires selon ces lois. Ces techniques sont décrites dans tous les livres de cours abordant la méthode de Monte Carlo dans un contexte radiatif (et elles sont implémentées dans le code source des méthodes que nous emploierons en TP).

Emission d'un volume élémentaire La densité volumique de puissance radiative émise en un point \vec{x} d'un milieu de coefficient d'absorption $k_{a,\nu}(\vec{x})$ et de température $T(\vec{x})$ est $\varphi_{\nu}^{e,\nu}(\vec{x}) = 4\pi k_{a,\nu}(\vec{x})L_{\nu}^{0}(T(\vec{x}))$. Cette densité de puissance est le résultat de photons émis de façon isotrope. Si on considère l'évènement statistique correspondant à l'émission de l'un de ces photons, la seule question qui se pose est la détermination de la direction $\vec{\omega}$ dans laquelle il a été émis. L'isotropie se traduit par le fait que la densité de probabilité de $\vec{\omega}$ est uniforme sur la sphère unité, soit

$$p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}) = \frac{1}{4\pi}$$

Emission d'un volume d'extension finie La puissance radiative émise par un volume V d'extension finie est la somme des émissions locales, soit $\phi_{\nu}^{e,v}(V) = \int_{V} \varphi_{\nu}^{e,v}(\vec{x}) d\vec{x}$. L'évènement statistique correspondant à l'émission de l'un des photons responsables de cette émission est entièrement défini par la position \vec{x} à laquelle le photon a été émis par la matière et par la direction $\vec{\omega}$ prise par ce photon. Comme précédemment, la direction est distribuée de façon isotrope, soit

$$p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}) = \frac{1}{4\pi}$$

et la densité de probabilité de la position refléte les variations spatiales de la densité de puissance émise, soit

$$p_{\vec{X}}(\vec{x}) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,v}(\vec{x})}{\phi_{\nu}^{e,v}(V)}$$

Remarque: En TP, dans le cas particulier d'un volume uniforme, lorsque nous souhaiterons générer aéatoirement une paire {position d'émission, direction d'émission}, nous ferons appel à la méthode mcmTirageVolumiqueUniformeIsotrope.

Emission d'une surface élémentaire La densité surfacique de puissance radiative émise en un point \vec{x} d'une surface de normale \vec{n} , d'émissivité hémisphérique $\epsilon_{\nu}(\vec{x})$ et de température $T(\vec{x})$ est $\varphi_{\nu}^{e,s}(\vec{x}) = \pi \epsilon_{\nu}(\vec{x}) L_{\nu}^{0}(T(\vec{x}))$. La distribution des directions d'émission des photons correspondants sur l'émisphère sortant $h(\vec{x})$ est

$$p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}) = \frac{\epsilon_{\nu}^d(\vec{\omega}, \vec{x})}{\epsilon_{\nu}(\vec{x})} \frac{\vec{\omega}.\vec{n}}{\pi}$$

où $\epsilon^d_{\nu}(\vec{\omega}, \vec{x})$ est l'émissivité directionnelle.

Emission d'une surface d'extension finie La puissance radiative émise par une surface S d'extension finie est la somme des émissions locales, soit $\phi_{\nu}^{e,s}(S) = \int_{S} \varphi_{\nu}^{e,s}(\vec{x}) d\vec{x}$. L'évènement statistique correspondant à l'émission de l'un des photons responsables de cette émission est entièrement défini par la position \vec{x} à laquelle le photon a été émis par la surface et par la direction $\vec{\omega}$ prise par ce photon. La densité de probabilité de la position reflète les variations spatiales de la densité de puissance émise, soit

$$p_{\vec{X}}(\vec{x}) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,s}(\vec{x})}{\phi_{\nu}^{e,s}(S)}$$

et comme précédemment, la direction est distribuée selon,

$$p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega};\vec{x}) = \frac{\epsilon_{\nu}^d(\vec{\omega},\vec{x})}{\epsilon_{\nu}(\vec{x})} \frac{\vec{\omega}.\vec{n}}{\pi}$$

Remarque : En TP, dans le cas particulier d'une surface uniforme et d'une émissivité indépendante de la direction, lorsque nous souhaiterons générer aéatoirement une paire {position d'émission, direction d'émission}, nous ferons appel à la méthode mcmTirageUniformeLambertien.

Collision avec une surface A tout instant, un photon est entièrement caractérisé par sa position courante \vec{x}_c et sa direction de déplacement $\vec{\omega}_c$. Cette position et cette direction définissent une demi-droite qui est le support de sa trajectoire jusqu'à la prochaine collision. Si le photon n'interagit pas avec la matière traversée, le lieu de la prochaine collision est la première intersection \vec{y} entre cette demi-droite et l'ensemble des surfaces du système. Lors de cette collision, la probabilité que le photon soit absorbé est

$$P_{abs} = \epsilon^d_{\nu}(-\vec{\omega}_c, \vec{y})$$

et si le photon n'est pas absorbé, il est réfléchi par la surface dans une nouvelle direction $\vec{\omega}$. L'évènement statistique correspondant à la collision du photon en \vec{y} se résume donc à la détermination du type de collision (absorption ou réflexion), puis dans le cas d'une réflexion, à la détermination de la direction de réflexion. La densité de probabilité de $\vec{\omega}$ dépend de la direction initiale $\vec{\omega}_c$ et cette dépendance est liée à la réflectivité bidirectionnelle $\rho_{\nu}^{dd}(\vec{\omega},\vec{\omega}_c,\vec{y})$ selon

$$p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}|\vec{\omega}_c;\vec{y}) = \vec{\omega}.\vec{n}\rho_{\nu}^{dd}(\vec{\omega},\vec{\omega}_c,\vec{y})$$

où \vec{n} est la normale à la surface en \vec{y} . Il est important de retenir que cette densité de probabilité n'est pas réciproque : $p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}|\vec{\omega}_c;\vec{y}) \neq p_{\vec{\Omega}}(-\vec{\omega}_c|-\vec{\omega};\vec{y})$. Le principe de réciprocité impose en effet la réciprocité de la réflectivité bidirectionnelle, ce qui se traduit par

$$\frac{p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}|\vec{\omega}_c;\vec{y})}{\vec{\omega}.\vec{n}} = \frac{p_{\vec{\Omega}}(-\vec{\omega}_c|-\vec{\omega};\vec{y})}{-\vec{\omega}_c.\vec{n}}$$

Collision avec la matière constituant le milieu traversé Pour un photon initialement en \vec{x}_c dans la direction $\vec{\omega}_c$, nous avons noté \vec{y} le lieu de la collision avec la première surface rencontrée. Si la matière traversée peut absorber ou diffuser le photon considéré, on note τ_{seg} l'épaisseur optique du ségment de droite $[\vec{x}_c, \vec{y}]$, soit

$$\tau_{seg} = \int_{[\vec{x}_c, \vec{y}]} \left(k_{a,\nu}(\vec{z}) + k_{d,\nu}(\vec{z}) \right) d\vec{z}$$

où $k_{a,\nu}(\vec{z})$ et $k_{d,\nu}(\vec{z})$ sont respectivement les coefficient d'absorption et de diffusion au point \vec{z} courant le long du segment. La probabilité que le photon collisionne en un des points du segment, avant de rencontrer la surface, est

$$P_{col} = 1 - exp(-\tau_{seg})$$

Si une telle collision a lieu, sa position \vec{z} est distribuée le long du segment selon la densité de probabilité

$$p_{\vec{Z}}(\vec{z}; \vec{x}_c, \vec{\omega}_c) = \frac{(k_{a,\nu}(\vec{z}) + k_{d,\nu}(\vec{z})) \exp(-\tau(\vec{z}))}{P_{col}}$$

où $\tau(\vec{z})$ est l'épaisseur optique du ségment $[\vec{x}_c, \vec{z}]$. Une fois connue la position de collision, la probabilité que cette collision soit une absorption est

$$P_{abs} = \frac{k_{a,\nu}(\vec{z})}{k_{a,\nu}(\vec{z}) + k_{d,\nu}(\vec{z})}$$

Si le photon n'est pas absorbé, il est diffusé dans une direction $\vec{\omega}$ dont la densité de probabilité est liée à la fonction de phase $\mathcal{D}_{\nu}(\vec{\omega}, \vec{\omega}_c, \vec{z})$ selon

$$p_{\vec{\Omega}}(\vec{\omega}|\vec{\omega}_c;\vec{z}) = \frac{1}{4\pi} \mathcal{D}_{\nu}(\vec{\omega},\vec{\omega}_c,\vec{z})$$

Collisions nulles Il est parfois utile de transformer le problème considéré en ajoutant des diffuseurs virtuels. Lorsqu'un photon rencontre l'un de ces diffuseurs, il est diffusé vers l'avant : la direction de diffusion $\vec{\omega}$ est strictement identique à la direction initiale $\vec{\omega}_c$. De tels diffuseurs ne modifient donc pas la trajectoire du photon et on peut en ajouter une quantité arbitraire sans perturber aucunement le transfert énergétique. Dans la littérature, lorsqu'on introduit de tels diffuseurs afin de simplifier une procédure numérique, on parle de techniques de *collisions nulles*. Nous noterons ici $k_{n,\nu}(\vec{z})$ le coefficient de diffusion associé aux collisions nulles à la position \vec{z} . Dans le problème physique modifié, le nouveau coefficient de diffusion est alors

$$k_{d,\nu}(\vec{z}) = k_{d,\nu}(\vec{z}) + k_{n,\nu}(\vec{z})$$

et la fonction de phase devient

$$\hat{\mathcal{D}}_{\nu}(\vec{\omega}, \vec{\omega}_{c}, \vec{z}) = \frac{k_{d,\nu}(\vec{z})\mathcal{D}_{\nu}(\vec{\omega}, \vec{\omega}_{c}, \vec{z}) + k_{n,\nu}(\vec{z})4\pi\delta(\vec{\omega} - \vec{\omega}_{c})}{k_{d,\nu}(\vec{z}) + k_{n,\nu}(\vec{z})}$$

où δ est la fonction Dirac qui traduit le fait qu'après une collision nulle $\vec{\omega} = \vec{\omega}_c$. Le coefficient d'absortion est inchangé :

$$\hat{k}_{a,\nu}(\vec{z}) = k_{a,\nu}(\vec{z})$$

Les probabilités et densités de probabilités définies au paragraphe précédent sont alors obtenues en utilisant ces grandeurs modifiées, le principal intérêt pratique étant que l'on peut ajuster le champs de $k_{n,\nu}$ (choisir la distribution spatiale des collisions nulles) de façon à simplifier la distribution des positions de collision et permettre un échantillonnage efficace de $p_{\vec{z}}(\vec{z}; \vec{x}_c, \vec{\omega}_c)$. 16CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA MODÉLISATION STATISTIQUE DU TRANSPORT DE PHOTONS (RAPPEL DU

Chapitre 3

Algorithmes de Monte Carlo analogues (exemples)

Dans les exemples qui suivent, nous considérons une enceinte remplie d'un milieu participant. Nous délimitons deux surfaces S_0 et S_1 sur la paroi de l'enceinte et deux volumes \mathcal{V}_0 et \mathcal{V}_1 dans le milieu. Si \mathcal{A} et \mathcal{B} sont deux parmis ces quatre éléments, nous notons $\phi_{\nu}(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ la puissance correspondant aux photons émis par \mathcal{A} qui sont absorbés par \mathcal{B} , en régime stationnaire. Si besoin, pour chacun de ses objets géométriques, nous n'hésiterons pas à utiliser le même symbole pour l'objet et son extension géométrique (S_0 pourra représenter à la fois l'objet surfacique lui-même et la surface de celui-ci). Nous parlerons aussi de milieux homogènes même si ceux-ci sont anisothermes : l'homogénéité ne qualifiera pour nous que les propriétés optiques du milieu. Par exemple, un milieu purement absorbant sera dit homogène si le coefficient d'absorption est indépendant de la position; il pourra malgré tout être anisotherme si le coefficient d'absorption est indépendant de la température.

 $\phi_{\nu}(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ est une puissance et non un transfert d'énergie associé à un nombre défini de photons. Pour autant, il est tout à fait possible de faire appel aux images physiques rappelées au chapitre précédent pour construire des algorithmes de Monte Carlo sur une base très intuitive : il suffit de partir de l'image de photons qui sont les propagateurs de la puissance $\phi_{\nu}^{e}(\mathcal{A})$ émise par \mathcal{A} . On fait alors porter à chaque photon l'intégralité de la puissance émise et on génère aléatoirement une trajectoire pour ce photon selon les lois statistiques d'émission, de diffusion, de réflexion et d'absorbtion. Si l'absorption a lieu au sein de \mathcal{B} , le poids associé à ce photon est $w = \phi_{\nu}^{e}(\mathcal{A})$, sinon w = 0. La puissance recherchée $\phi_{\nu}(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ est alors simplement la moyenne de ces poids. Pour chaque photon, on raisonne donc comme si il était l'unique propagateur de la puissance émise par \mathcal{A} , puis on prend la moyenne sur l'ensemble des trajectoires de photons.

Au premier abord, cette image physique d'un "photon" qui porte l'intégralité de la puissance émise est perturbante, mais après une courte phase de familiarisation (qui sera l'objet des premiers TP) il devient facile, grace à elle, de concevoir des algorithmes analogues et d'avoir pleinement confiance en le fait qu'un algorithme ainsi conçu évalue bien rigoureusement la grandeur recherchée. Dès les premiers exemples, nous verrons que cette image physique permet même d'aborder une famille d'algorithmes dans lesquels le poids associé au photon dépend de chaque photon (notamment de sa position et de sa direction d'émission) et évolue au cours de la trajectoire. La conception de tels algorithmes demande plus de rigueur, mais il s'agit encore d'algorithmes analogues ne demandant aucun travail formel. Bien sûr, plus on augmente la complexité de l'algorithme, plus on est conduit à douter qu'une approche purement intuitive suffise à garantir l'exactitude des résultats numériques obtenus. C'est pourtant le principal atout de la méthode de Monte Carlo. La pratique montre en effet que l'on peut pousser très loin le niveau de complexité physique et algorithmique sur une base purement intuitive, avec seulement une bonne maîtrise des rappels précédents sur l'interprétation statistique du rayonnement. Pour autant il reste souvent nécessaire de passer par une étape de validation rigoureuse et nous verrons qu'il existe alors une procédure sytématique de formulation intégrale qui permet de s'assurer, a posteriori, qu'un algorithme ainsi conçu évalue bien la grandeur recherchée (paragraphe 6.2).

3.1 Notations et présentation algorithmique

Les algorithmes présentés dans ce chapitre évaluent tous $A = \phi_{\nu}(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ en utilisant N photons. Le *i*-ème photon se traduit par un poids noté w_i et les N poids sont utilisés pour contruire un estimateur de A, noté m, accompagné d'une incertitude, notée s. Pour chaque exemple, on utilisera la même structure algorithmique, décrite dans la figure 3.1, la spécificité de chaque exemple résidant dans le suivi du photon et le calcul du poids. Lors de la description des

somme = 0;		
sommeDesCarres = 0;		
foreach event i do		
Réalisation de w_i ;		
$somme = somme + w_i;$		
$sommeDesCarres = sommeDesCarres + w_i^2$		
end		
$m = \frac{somme}{N};$		
$s = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{somme Des Carres}{N} - m^2 \right);$		

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i \approx E(W)$$
$$s = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i^2 - m^2 \right) \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(W)$$

FIG. 3.1 – Description de la structure algorithmique commune à tous les exemples. La solution du problème, A, est regardée comme l'espérance d'une variable aléatoire poids, W, de densité de probabilité p_W . En pratique, cette densité de probabilité n'est jamais explicitée. Le poids résulte de la combinaison de plusieurs tirages aléatoires (position d'émission, direction, etc), dont les densités de probabilités correspondent aux descriptions statistiques du chapitre 2 et sont donc explicites, mais il est rarement utile de construire formellement p_W . Il suffit de retenir qu'une variable aléatoire poids existe, qu'elle est échantillonnée, que la solution exacte du problème est égale à son espérance $E(W) = \int p_W(w)wdw$, que l'on estime cette espérance à l'aide de N échantillons, et que l'incertitude de l'estimateur est reliée à l'écart type de la variable aléatoire poids $\sigma(W) = \int p_W(w)w^2dw - E(W)^2$ (voir la section 6.1).

exemples, nous ne donnerons donc que l'algorithme utilisé pour le suivi d'un seul photon et le calcul du poids associé. Nous utiliserons les notations suivantes :

- $-\vec{x}_0$ et $\vec{\omega}_0$ sont respectivement la position et la direction d'émission.
- $-\vec{y}_0$ est la première intersection avec la paroi de la demi-droite issue de \vec{x}_0 dans la direction $\vec{\omega}_0$.
- Dans le cas où des collisions ont lieu dans le milieu (avant la collision avec la paroi), \vec{z}_0 est la position de la première de ces collisions depuis \vec{x}_0 dans la direction $\vec{\omega}_0$.
- Si le photon n'est pas absorbé lors de la première collision (avec la paroi ou avec le milieu), on note \vec{x}_1 la position de cette collision et $\vec{\omega}_1$ la direction du photon après la collision. On a donc $\vec{x}_1 = \vec{y}_0$ dans le cas d'une réflexion par la paroi et $\vec{x}_1 = \vec{z}_0$ dans le cas d'une diffusion par le milieu.
- Si le photon est réfléchi ou diffusé plusieurs fois avant d'être absorbé, on note n le nombre de réflexions/diffusions et n-1 paires de positions/directions $(\vec{x}_2, \vec{\omega}_2), (\vec{x}_3, \vec{\omega}_3) \dots (\vec{x}_n, \vec{\omega}_n)$ sont définies récursivement à partir de $(\vec{x}_1, \vec{\omega}_1)$ de la même façon que $(\vec{x}_1, \vec{\omega}_1)$ a été défini à partir de $(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0)$.

3.2 Exemples sans diffusion et sans réflexion

Supposons d'abord que la paroi de l'enceinte est noire et que le milieu est non-diffusant. Il n'y a donc ni réflexion pariétale ni diffusion et les photons se déplacent en ligne droite depuis leur position d'émission jusqu'à leur position d'absorption.

Exemple 1 : $\mathcal{A} \equiv \mathcal{V}_0$ isotherme, $\mathcal{B} \equiv \mathcal{V}_1$, milieu homogène

Dans ce premier exemple, le milieu est homogène, donc le coefficient d'absorption $k_{a,\nu}(\vec{x})$ est indépendant de \vec{x} . Le volume \mathcal{V}_0 est isotherme et on note T_0 sa température. On cherche à évaluer $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. On construit ci-dessous, étape par étape, l'algorithme donné dans la figure 3.2 à partir des images physiques introduites dans la section précédente. Dans la même figure, l'algorithme est également traduit sous la forme d'une intégrale évaluant $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$ car nous nous servirons de ce type d'intégrales à partir du chapitre 6.

18

3.2. EXEMPLES SANS DIFFUSION ET SANS RÉFLEXION

- Le poids : En tout point \vec{x} de ce volume on a $T(\vec{x}) = T_0$ et la densité volumique de puissance radiative émise est donc la même en tout point (voir le chapitre 2) : $\varphi_{\nu}^{e,\nu}(\vec{x}) = 4\pi k_{a,\nu}(\vec{x})L_{\nu}^{0}(T(\vec{x})) = 4\pi k_{a,\nu}L_{\nu}^{0}(T_0)$. La puissance émise par l'ensemble du volume \mathcal{V}_0 est donc

$$\phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0) = \int_{\mathcal{V}_0} \varphi_{\nu}^{e,v}(\vec{x}) d\vec{x} = 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L_{\nu}^0(T_0)$$

Algorithmiquement, le poids associé à chaque photon sera égal à cette puissance, soit $w = \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0) = 4\pi k_{a,\nu} L_{\nu}^0(T_0)$ si le photon est finalement absorbé par le volume \mathcal{V}_1 , et w = 0 sinon.

- Direction et position d'émission : La direction d'émission d'un photon, $\vec{\omega}_0$, est distribuée de façon isotrope sur 4π d'angle solide, soit

$$p_{\vec{\Omega}_0}(\vec{\omega}_0) = \frac{1}{4\pi}$$

et sa position d'émission, \vec{x}_0 , est distribuée sur \mathcal{V}_0 selon

$$p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,v}(\vec{x}_0)}{\phi_{\nu}^{e,v}(V)} = \frac{4\pi k_{a,\nu} L_{\nu}^0(T_0)}{4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L_{\nu}^0(T_0)} = \frac{1}{\mathcal{V}_0}$$

c'est à dire de façon uniforme (car \mathcal{V}_0 est à la fois homogène et isotherme). Pour chaque photon, $\vec{\omega}_0$ et \vec{x}_0 sont donc générés aléatoirement selon ces deux distributions et définissent un rayon qui intersecte la paroi en \vec{y}_0 .

- Absorption : A ce stade, la question qui se pose est la suivante : le photon sera-t'il absorbé par le milieu avant d'atteindre la paroi et si oui à quelle position ? Comme le milieu est non diffusant, le coefficient de diffusion $k_{d,\nu}$ est nul en tout point. De plus le milieu est homogène. Le coefficient d'absorption est donc indépendant de la position. L'épaisseur optique du rayon jusqu'à la paroi est alors

$$\tau_{seg} = \int_{[\vec{x}_0, \vec{y}_0]} \left(k_{a,\nu}(\vec{z}) + k_{d,\nu}(\vec{z}) \right) d\vec{z} = k_{a,\nu} ||\vec{y}_0 - \vec{x}_0||$$

La probabilité que le photon collisionne avant la paroi est donc

$$P_{col} = 1 - exp(-\tau_{seg}) = 1 - exp(-k_{a,\nu}||\vec{y}_0 - \vec{x}_0||)$$

Si la collision a lieu, c'est une absorption (car le milieu est non diffusant) et sa position $\vec{z_0}$ est distribuée le long du rayon selon la densité de probabilité

$$p_{\vec{Z}_0}(\vec{z}_0; \vec{x}_0, \vec{\omega}_0) = \frac{(k_{a,\nu}(\vec{z}_0) + k_{d,\nu}(\vec{z}_0))\exp(-\tau(\vec{z}_0))}{P_{col}} = \frac{k_{a,\nu}\exp\left(-k_{a,\nu}||\vec{z}_0 - \vec{x}_0||\right)}{1 - \exp\left(-k_{a,\nu}||\vec{y}_0 - \vec{x}_0||\right)}$$

Algorithmiquement, on peut donc commencer par générer aléatoirement une des branches de l'alternative "absorption par le milieu" versus "impact paroi" (test de Bernoulli de probabilité P_{col}). Dans le cas d'un impact paroi, $\vec{x}_1 = \vec{y}_0$ et dans le cas d'une absorption on génère aléatoirement la position d'absorption \vec{z}_0 selon $p_{\vec{Z}_0}$ et on retient $\vec{x}_1 = \vec{z}_0$.

En pratique, l'algorithme communément retenu est plus simple. On imagine que le rayon est infini : il se poursuit virtuellement après la paroi comme si la paroi était remplacée par un milieu semi-infini (toujours non diffusant et de coefficient d'absorption $k_{a,\nu}$). La trajectoire du photon se termine donc toujours par une absorption en un point $\vec{z_0}$ distribué sur la demi-droite $\mathcal{R}(\vec{x_0}, \vec{\omega_0})$ issue de $\vec{x_0}$ dans la direction $\vec{\omega_0}$, selon la densité de probabilité

$$p_{\vec{Z}_0}(\vec{z}_0; \vec{x}_0, \vec{\omega}_0) = k_{a,\nu} exp\left(-k_{a,\nu} || \vec{z}_0 - \vec{x}_0 ||\right)$$

Cette densité de probabilité est la même que précédemment, mais la paroi est ici virtuellement reportée à l'infini. On génère alors aléatoirement une position d'absorption dans cette nouvelle configuration et on regarde si cette absorption est située avant ou après la paroi effective $(||\vec{z}_0 - \vec{x}_0||$ inférieur ou supérieur à $||\vec{y}_0 - \vec{x}_0||$). Si elle est située avant, elle est retenue comme une absorption effective : $\vec{x}_1 = \vec{z}_0$. Si elle est située après, on retient que le photon a rencontré la paroi : $\vec{x}_1 = \vec{y}_0$. La dernière étape consiste à déterminer si \vec{x}_1 est situé dans le volume \mathcal{V}_1 . Si c'est le cas, alors $w = \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon w = 0. Pour représenter ces tests dans les formulations intégrales du chapitre 6, on introduira une fonction \hat{w} permettant d'écrire $w = \hat{w}(\vec{z}_0)$, avec $\hat{w}(\vec{z}_0) = \mathcal{H}(||\vec{z}_0 - \vec{x}_0||) < ||\vec{y}_0 - \vec{x}_0||) \mathcal{H}(\vec{z}_0 \in \mathcal{V}_1) \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, où $\mathcal{H}(test)$ prend la valeur 1 si test est vrai et 0 sinon.

Exemple 2 : $\mathcal{A} \equiv \mathcal{V}_0$ isotherme, $\mathcal{B} \equiv \mathcal{S}_1$, milieu homogène

On cherche à évaluer $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{S}_1)$ sachant que \mathcal{V}_0 est isotherme, à la temperature T_0 , et que le milieu est homogène. L'algorithme employé est décrit dans la figure 3.3. Il est identique à celui de l'exemple 1. Seul le dernier test diffère : si \vec{x}_1 est situé sur la surface \mathcal{S}_1 alors $w = \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon w = 0.

Exemple 3 : $\mathcal{A} \equiv \mathcal{S}_0$ isotherme, $\mathcal{B} \equiv \mathcal{V}_1$, milieu homogène

On cherche à évaluer $A = \phi_{\nu}(S_0, \mathcal{V}_1)$ sachant que S_0 est noire, isotherme à la temperature T_0 , et que le milieu est homogène. L'algorithme employé est décrit dans la figure 3.4.

- Le poids : En tout point \vec{x} de S_0 on a $\epsilon_{\nu}(\vec{x}) = 1$ et $T(\vec{x}) = T_0$. La densité surfacique de puissance radiative émise en \vec{x} est donc $\varphi_{\nu}^{e,s}(\vec{x}) = \pi \epsilon_{\nu}(\vec{x}) L_{\nu}^{eq}(T(\vec{x})) = \pi L_{\nu}^{eq}(T_0)$ et la puissance émise par S_0 devient (voir le chapitre 2)

$$\phi_{\nu}^{e,s}(\mathcal{S}_0) = \int_{\mathcal{S}_0} \varphi_{\nu}^{e,s}(\vec{x}) d\vec{x} = \pi \mathcal{S}_0 L_{\nu}^{eq}(T_0)$$

Algorithmiquement, le poids associé à chaque photon sera égal à cette puissance, soit $w = \phi_{\nu}^{e,s}(\mathcal{S}_0)$ si le photon est finalement absorbé par le volume \mathcal{V}_1 , et w = 0 sinon.

- Direction et position d'émission : La position d'émission d'un photon, \vec{x}_0 , est distribuée sur S_0 selon

$$p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,s}(\vec{x}_0)}{\phi_{\nu}^{e,s}(\mathcal{S}_0)} = \frac{1}{\mathcal{S}_0}$$

c'est à dire de façon uniforme. Sa direction, $\vec{\omega}_0$, est distribuée de façon lambertienne sur l'hémisphère sortant $h(\vec{x}_0)$, i.e. selon

$$p_{\vec{\Omega}_0}(\vec{\omega}_0) = \frac{\epsilon_{\nu}^d(\vec{\omega}, \vec{x})}{\epsilon_{\nu}(\vec{x})} \frac{\vec{\omega}.\vec{n}}{\pi} = \frac{\vec{\omega}.\vec{n}}{\pi}$$

- Absorption : L'absorption est gérée de la même manière que dans l'exemple 1.

Exemple 4 : $\mathcal{A} \equiv \mathcal{S}_0$ isotherme, $\mathcal{B} \equiv \mathcal{S}_1$, milieu homogène

On cherche à évaluer $A = \phi_{\nu}(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ sachant que \mathcal{S}_0 est noire et isotherme, à la temperature T_0 , et que le milieu est homogène. L'algorithme employé est décrit dans la figure 3.5. Il est identique à celui de l'exemple 3. Seul le dernier test diffère : si \vec{x}_1 est situé sur la surface \mathcal{S}_1 alors $w = \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon w = 0.

Exemple 5 : $\mathcal{A} \equiv \mathcal{V}_0$ anisotherme, $\mathcal{B} \equiv \mathcal{V}_1$, milieu homogène

Nous reprennons ici l'exemple 1 en tenant compte d'une éventuelle anisothermie du volume émetteur. Par contre, nous conservons l'hypothèse d'un milieu homogène. Nous avons déjà précisé que nous réservons les adjectifs *homogène* et *hétérogène* pour qualifier les propriétés optiques (ici le coefficient d'absorption). Un milieu peut donc être à la fois anisotherme *et* homogène si la température dépend de la position alors que le coefficient d'absorption peut encore être supposé uniforme.

Dans une logique strictement analogue, on pourrait employer le même algorithme que pour l'exemple 1. Les seules différences seraient

- la densité de probabilité de la position d'émission, qui était $p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0) = \frac{1}{\mathcal{V}_0}$ dans le cas isotherme, et qui deviendrait

$$p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,v}(\vec{x}_0)}{\phi_{\nu}^{e,v}(V)} = \frac{4\pi k_{a,\nu} L_{\nu}^0(T(\vec{x}_0))}{4\pi k_{a,\nu} \int_{\mathcal{V}_0} L_{\nu}^0(T(\vec{x})) d\vec{x}} = \frac{L_{\nu}^0(T(\vec{x}_0))}{\int_{\mathcal{V}_0} L_{\nu}^0(T(\vec{x})) d\vec{x}}$$

– le poids, qui était $w = 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L^0_{\nu}(T_0)$ dans le cas isotherme, et qui deviendrait

$$w = \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0) = \int_{\mathcal{V}_0} \varphi_{\nu}^{e,v}(\vec{x}) d\vec{x} = \int_{\mathcal{V}_0} 4\pi k_{a,\nu} L_{\nu}^0(T(\vec{x})) d\vec{x} = 4\pi k_{a,\nu} \int_{\mathcal{V}_0} L_{\nu}^0(T(\vec{x})) d\vec{x}$$

Ces deux différences font apparaître l'intégrale $\int_{\mathcal{V}_0} L^0_{\nu}(T(\vec{x})) d\vec{x}$ qui est inconnue (en toute généralité). Un tel algorithme est donc impraticable. Cette constatation traduit simplement le fait que lorsque la distribution des positions d'émission est quelconque, son échantillonnage est potentiellement difficile et il est également difficile de déterminer la somme de toutes les émission, c'est à dire que la puissance totale émise par \mathcal{V}_0 est inconnue. Donc même si on trouvait une façon d'échantilloner les positions d'émission (par exemple à l'aide d'une méthode de rejet), le poids w resterait inconnu.

On quitte alors la stricte analogie en acceptant que l'échantillonnage des positions d'émission ne reflète pas rigoureusement $p_{\vec{X}_0}$. On choisi une autre densité de probabilité pour les positions d'émission, une densité ne posant aucune difficulté d'échantillonnage, que l'on note $\tilde{p}_{\vec{X}_0}$, par exemple une densité de probabilité uniforme comme dans le cas isotherme, soit $\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0) = \frac{1}{V_0}$. On sait donc que certaines positions seront échantillonnées trop souvent, d'autres pas assez souvent. Mais on compense ce biais en modifiant le poids. On retient

$$\tilde{w} = w \frac{p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}{\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)} = 4\pi k_{a,\nu} \int_{\mathcal{V}_0} L^0_{\nu}(T(\vec{x})) d\vec{x} \frac{\frac{L^0_{\nu}(T(\vec{x}_0))}{\int_{\mathcal{V}_0} L^0_{\nu}(T(\vec{x})) d\vec{x}}}{\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)} = 4\pi k_{a,\nu} L^0_{\nu}(T(\vec{x}_0)) \frac{1}{\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}$$

T() (**T**(**A**))

3.3. EXEMPLES AVEC DIFFUSION

Le rapport $\frac{p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}{\hat{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}$ compense rigoureusement le biais d'échantillonnage et le produit $wp_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)$ fait disparaitre l'intégrale $\int_{\mathcal{V}_0} L_{\nu}^0(T(\vec{x})) d\vec{x}$ qui posait le problème d'être inconnue. Mais le nouveau poids dépend de \vec{x}_0 et à travers l'échantillonnage des positions, les variations de ce poids permettrons de reconstruire l'information manquante (la puissance totale émise par \mathcal{V}_0). Un tel algorithme biaisé reste très intuitif : lorsque $\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)$ est inférieur à $p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)$, la position \vec{x}_0 est sous-échantillonnée d'un facteur $\frac{\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}{p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}$ et on compense simplement ce biais d'échantillonnage en accordant au photons partant de \vec{x}_0 un poids augmenté du facteur inverse $\frac{p_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}{\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)}$. Nous retrouverons cette technique au paragraphe 4.1 avec un objectif d'optimisation de convergence et surtout nous en justifierons pleinement la rigueur au chapitre 6 à partir de manipulations intégrales très simples. Elle fait partie des techniques nécessaires à une utilisation minimum de la méthode de Monte Carlo. L'algorithme correspondant est décrit dans la figure 3.6.

3.3 Exemples avec diffusion

On s'intéresse maintenant à des configurations dans lesquelles le milieu n'est plus seulement absorbant et émetteur, mais est également diffusant. Les parois de l'enceinte restent noires, mais les algorithmes avec réflexions sont très proches des algorithmes avec diffusion et le traitement des réflexions pariétales pourra être l'objet d'un exercice de TP.

Exemple 6 : reprise de l'exemple 1 avec diffusion

On reprend l'exemple 1 en tenant compte de la diffusion. Le milieu est homogène, donc le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion et la fonction de phase sont indépendants de la position. Le volume \mathcal{V}_0 est isotherme et on note T_0 sa température. On cherche à évaluer $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. L'algorithme employé est décrit dans la figure 3.7.

- Le poids : Il est le même que dans l'exemple 1. En effet, les propriétés de diffusion ne modifient pas la puissance émise par le volume \mathcal{V}_0 .
- Direction et position d'émission : Elles sont également inchangées.
- Collision : Comme dans l'exemple 1, on imagine que le rayon partant de \vec{x}_0 dans la direction $\vec{\omega}_0$ est infini : il se poursuit virtuellement après la paroi comme si la paroi était remplacée par un milieu semi-infini. La trajectoire rectiligne du photon se termine donc en un point \vec{z}_0 distribué sur la demi-droite $\mathcal{R}(\vec{x}_0, \vec{\omega}_0)$ issue de \vec{x}_0 dans la direction $\vec{\omega}_0$, selon la densité de probabilité

$$p_{\vec{Z}_0}(\vec{z}_0; \vec{x}_0, \vec{\omega}_0) = (k_{a,\nu} + k_{d,\nu})exp\left(-(k_{a,\nu} + k_{d,\nu})||\vec{z}_0 - \vec{x}_0||\right)$$

On regarde si cette position de collision est située avant ou après la paroi effective $(||\vec{z}_0 - \vec{x}_0||$ inférieur ou supérieur à $||\vec{y}_0 - \vec{x}_0||$). Si elle est située avant, elle est retenue comme une collision effective dans le volume intérieur \mathcal{V} de l'enceinte, soit $\vec{x}_1 = \vec{z}_0 \in \mathcal{V}$. Si elle est située après, on retient que le photon a rencontré la paroi \mathcal{S} , soit $\vec{x}_1 = \vec{y}_0 \in \mathcal{S}$.

- Absorption ou diffusion : Si \vec{x}_1 est situé à la paroi, alors le photon est absorbé (car la paroi est noire) et w = 0. Si \vec{x}_1 est situé dans le volume \mathcal{V} , alors la collision correspondante est une absorption avec une probabilité $P_{abs} = \frac{k_{a,\nu}}{k_{a,\nu}+k_{d,\nu}}$. Dans le cas contraire c'est une diffusion et le photon repart de la position \vec{x}_1 dans une nouvelle direction $\vec{\omega}_1$, distribuée selon $p_{\vec{\Omega}_1}(\vec{\omega}_1|\vec{\omega}_0)$, jusqu'à la prochaine collision, etc. Lorsque le photon est absorbé dans le volume intérieur de l'enceinte, la dernière étape consiste à déterminer si la position d'absorption est située dans le volume \mathcal{V}_1 . Si c'est le cas, alors $w = \phi_{\nu}^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon w = 0.

Exemple 7 : reprise de l'exemple 5, donc sans diffusion, mais avec hétérogénéité en utilisant des collisions nulles

Traité en TP. Voir [2, 3].

Exemple 8 : reprise de l'exemple 7 avec diffusion

Traité en TP. Voir [2, 3].



Echantillonnage de la position d'émission \vec{x}_0 uniformément dans \mathcal{V}_0 ; Echantillonnage de la direction d'émission $\vec{\omega}_0$ de façon isotrope; Echantillonnage de la position d'absorption \vec{z}_0 selon la loi de Beer; if \vec{z}_0 est dans l'enceinte then | if \vec{z}_0 est dans \mathcal{V}_1 then | $w = 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L^0_{\nu}(T_0)$; else | w = 0; end else | w=0; end

 $Formulation\ intégrale:$

$$\phi_{\nu}(\mathcal{V}_{0},\mathcal{V}_{1}) = \int_{\mathcal{V}_{0}} p_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0}) d\vec{x}_{0} \int_{4\pi} p_{\vec{\Omega}_{0}}(\vec{\omega}_{0}) d\vec{\omega}_{0} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0})} p_{\vec{Z}_{0}}(\vec{z}_{0};\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0}) d\vec{z}_{0}\hat{w}(\vec{z}_{0})$$
$$\hat{w}(\vec{z}_{0}) = \mathcal{H}(||\vec{z}_{0}-\vec{x}_{0}|| < ||\vec{y}_{0}-\vec{x}_{0}||) \mathcal{H}(\vec{z}_{0}\in\mathcal{V}_{1}) 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_{0} L^{0}_{\nu}(T_{0})$$

FIG. 3.2 – **Exemple 1** : Algorithme de génération aléatoire du poids w, à combiner avec l'agorithme général de la figure 3.1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Algorithme:

Echantillonnage de la position d'émission \vec{x}_0 uniformément dans \mathcal{V}_0 ; Echantillonnage de la direction d'émission $\vec{\omega}_0$ de façon isotrope; Echantillonnage de la position d'absorption \vec{z}_0 selon la loi de Beer; **if** \vec{z}_0 est dans l'enceinte **then** | w=0;**else** $| w = 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L^0_{\nu}(T_0);$ **else** | w = 0;**end end**

 $Formulation\ intégrale:$

$$\phi_{\nu}(\mathcal{V}_{0},\mathcal{S}_{1}) = \int_{\mathcal{V}_{0}} p_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0}) d\vec{x}_{0} \int_{4\pi} p_{\vec{\Omega}_{0}}(\vec{\omega}_{0}) d\vec{\omega}_{0} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0})} p_{\vec{Z}_{0}}(\vec{z}_{0};\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0}) d\vec{z}_{0}\hat{w}(\vec{z}_{0})$$
$$\hat{w}(\vec{z}_{0}) = \mathcal{H}(||\vec{z}_{0}-\vec{x}_{0}|| > ||\vec{y}_{0}-\vec{x}_{0}||) \mathcal{H}(\vec{y}_{0}\in\mathcal{S}_{1}) 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_{0} L^{0}_{\nu}(T_{0})$$

FIG. 3.3 – **Exemple 2** : Algorithme de génération aléatoire du poids w, à combiner avec l'agorithme général de la figure 3.1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{S}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Echantillonnage de la position d'émission \vec{x}_0 uniformément sur S_0 ; Echantillonnage de la direction d'émission $\vec{\omega}_0$ de façon lambertienne; Echantillonnage de la position d'absorption \vec{z}_0 selon la loi de Beer; if \vec{z}_0 est dans l'enceinte then $| if \vec{z}_0 est dans \mathcal{V}_1$ then $| w = \pi S_0 L_{\nu}^0(T_0);$ else | w = 0;end else | w = 0;end

 $Formulation\ intégrale:$

$$\begin{split} \phi_{\nu}(\mathcal{S}_{0},\mathcal{V}_{1}) &= \int_{\mathcal{S}_{0}} p_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0}) d\vec{x}_{0} \int_{h(\vec{x}_{0})} p_{\vec{\Omega}_{0}}(\vec{\omega}_{0}) d\vec{\omega}_{0} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0})} p_{\vec{Z}_{0}}(\vec{z}_{0};\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0}) d\vec{z}_{0} \hat{w}(\vec{z}_{0}) \\ \hat{w}(\vec{z}_{0}) &= \mathcal{H}(||\vec{z}_{0}-\vec{x}_{0}|| < ||\vec{y}_{0}-\vec{x}_{0}||) \mathcal{H}(\vec{z}_{0}\in\mathcal{V}_{1}) \pi \mathcal{S}_{0} L^{0}_{\nu}(T_{0}) \end{split}$$

FIG. 3.4 – **Exemple 3** : Algorithme de génération aléatoire du poids w, à combiner avec l'agorithme général de la figure 3.1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_{\nu}(S_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Echantillonnage de la position d'émission \vec{x}_0 uniformément sur S_0 ; Echantillonnage de la direction d'émission $\vec{\omega}_0$ de façon lambertienne; Echantillonnage de la position d'absorption \vec{z}_0 selon la loi de Beer; if \vec{z}_0 est dans l'enceinte then | w=0;else $| w = \pi S_0 L^0_{\nu}(T_0);$ else | w = 0;end

Formulation intégrale :

$$\begin{split} \phi_{\nu}(\mathcal{S}_{0},\mathcal{S}_{1}) &= \int_{\mathcal{S}_{0}} p_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0}) d\vec{x}_{0} \int_{h(\vec{x}_{0})} p_{\vec{\Omega}_{0}}(\vec{\omega}_{0}) d\vec{\omega}_{0} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0})} p_{\vec{Z}_{0}}(\vec{z}_{0};\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0}) d\vec{z}_{0} \hat{w}(\vec{z}_{0}) \\ \hat{w}(\vec{z}_{0}) &= \mathcal{H}(||\vec{z}_{0}-\vec{x}_{0}|| > ||\vec{y}_{0}-\vec{x}_{0}||) \mathcal{H}(\vec{y}_{0} \in \mathcal{S}_{1}) \pi \mathcal{S}_{0} L^{0}_{\nu}(T_{0}) \end{split}$$

FIG. 3.5 – **Exemple 4** : Algorithme de génération aléatoire du poids w, à combiner avec l'agorithme général de la figure 3.1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_{\nu}(S_0, S_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.

Echantillonnage de la position d'émission \vec{x}_0 selon $\tilde{p}_{\vec{X}_0}$ dans \mathcal{V}_0 , par exemple de façon uniforme, i.e. $\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0) = \frac{1}{\mathcal{V}_0}$; Echantillonnage de la direction d'émission $\vec{\omega}_0$ de façon isotrope; Echantillonnage de la position d'absorption \vec{z}_0 selon la loi de Beer; if \vec{z}_0 est dans l'enceinte then if \vec{z}_0 est dans \mathcal{V}_1 then $| w = 4\pi k_{a,\nu} L^0_{\nu}(T(\vec{x}_0) \frac{1}{\tilde{p}_{\vec{X}_0}(\vec{x}_0)};$ else | w = 0;end else | w=0;end

Formulation intégrale :

$$\begin{split} \phi_{\nu}(\mathcal{V}_{0},\mathcal{V}_{1}) &= \int_{\mathcal{V}_{0}} \tilde{p}_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0}) d\vec{x}_{0} \int_{4\pi} p_{\vec{\Omega}_{0}}(\vec{\omega}_{0}) d\vec{\omega}_{0} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0})} p_{\vec{Z}_{0}}(\vec{z}_{0};\vec{x}_{0},\vec{\omega}_{0}) d\vec{z}_{0} \hat{w}(\vec{z}_{0}) \\ \hat{w}(\vec{z}_{0}) &= \mathcal{H}(||\vec{z}_{0}-\vec{x}_{0}|| < ||\vec{y}_{0}-\vec{x}_{0}||) \mathcal{H}(\vec{z}_{0}\in\mathcal{V}_{1}) 4\pi k_{a,\nu} L^{0}_{\nu}(T(\vec{x}_{0})) \frac{1}{\tilde{p}_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0})} \end{split}$$

FIG. 3.6 – **Exemple 5** : Algorithme de génération aléatoire du poids \tilde{w} , à combiner avec l'agorithme général de la figure 3.1 (en remplaçant w par \tilde{w}) pour obtenir une évaluation de $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids \tilde{w} en fonction de la position d'absorption.

3.4 Exemples avec poids variables

Exemple 9 : reprise de l'exemple 4 avec atténuation exponentielle du poids

Exemple 10 : reprise de l'exemple 1 avec atténuation exponentielle du poids

Exemple 11 : reprise de l'exemple 9 avec diffusion et réflexion pariétale

Exemple 12 : reprise de l'exemple 8 avec modification du poids lors de chaque collision Voir [3].

3.5 Exemples d'intégration fréquentielle

Exemple 13 : reprise de l'exemple 4 avec deux bandes grises ou une raie d'absorption Exemple 14 : reprise de l'exemple 1 avec deux bandes grises ou une raie d'absorption Exemple 15 : reprise l'exemple 1 avec des k-distributions sur plusieurs bandes étroites

26



Echantillonnage de la position d'émission \vec{x}_0 uniformément dans \mathcal{V}_0 ; Echantillonnage de la direction d'émission $\vec{\omega}_0$ de façon isotrope; Echantillonnage de la position de collision $\vec{z_0}$ selon la loi de Beer à partir de $\vec{x_0}$ dans la direction $\vec{\omega_0}$; i = 0;start; if $\vec{z_i}$ est dans l'enceinte then $\vec{x}_{i+1} = \vec{z}_i;$ Détermination du type de collision (test de Bernoulli); ${\bf if} \ Absorption \ {\bf then}$ if \vec{x}_{i+1} est dans \mathcal{V}_1 then $| w = 4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L^0_{\nu}(T_0);$ else | w = 0;end else Echantillonage de la direction $\vec{\omega}_{i+1}$ après diffusion; Echantillonnage de la position de collision \vec{z}_{i+1} selon la loi de Beer à partir de \vec{x}_{i+1} dans la direction $\vec{\omega}_{i+1};$ i = i + 1;go to start; \mathbf{end} else $\vec{x}_{i+1} = \vec{y}_i;$ w = 0;end

Formulation intégrale :

$$A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_{0}, \mathcal{V}_{1}) = \int_{\mathcal{V}_{0}} p_{\vec{X}_{0}}(\vec{x}_{0}) d\vec{x}_{0} \int_{4\pi} p_{\vec{\Omega}_{0}}(\vec{\omega}_{0}) d\vec{\omega}_{0} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{0}, \vec{\omega}_{0})} p_{\vec{Z}_{0}}(\vec{z}_{0}; \vec{x}_{0}, \vec{\omega}_{0}) d\vec{z}_{0} \left\{ \mathcal{H}(\vec{x}_{1} \in \mathcal{S}) \hat{w}(\vec{x}_{1}) + \mathcal{H}(\vec{x}_{1} \in \mathcal{V}) \left\{ P_{abs} \hat{w}(\vec{x}_{1}) + (1 - P_{abs}) A_{1} \right\} \right\}$$
(3.1)

$$A_{i} = \int_{4\pi} p_{\vec{\Omega}_{i}}(\vec{\omega}_{i}|\vec{\omega}_{i-1}) d\vec{\omega}_{i} \int_{\mathcal{R}(\vec{x}_{i},\vec{\omega}_{i})} p_{\vec{Z}_{i}}(\vec{z}_{i};\vec{x}_{i},\vec{\omega}_{i}) d\vec{z}_{i}$$

$$\{\mathcal{H}(x_{i+1} \in \mathcal{S})w_{i+1}(x_{i+1}) + \mathcal{H}(x_{i+1} \in \mathcal{V}) \{P_{abs}w_{i+1}(x_{i+1}) + (1 - P_{abs})A_{i+1}\}\}$$

$$\hat{w}_i(\vec{x}_i) = \mathcal{H}(\vec{x}_i \in \mathcal{V}_1)4\pi k_{a,\nu} \mathcal{V}_0 L^0_\nu(T_0)$$
(3.3)

FIG. 3.7 – **Exemple 6** : Algorithme de génération aléatoire du poids w, à combiner avec l'agorithme général de la figure 3.1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_{\nu}(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante.

Chapitre 4

Optimisation d'un algorithme analogue

Voir [1].

- 4.1 Echantillonnage par importance
- 4.2 Variables de contrôle
- 4.3 Reformulation intégrale

CHAPITRE 4. OPTIMISATION D'UN ALGORITHME ANALOGUE

Chapitre 5

Mise en oeuvre

Voir [1, 3, 4].

Deuxième partie Approfondissements

Chapitre 6

Formulation intégrale

Voir [1].

- 6.1 Rappels de probabilité
- 6.2 Traduction systématique d'un algorithme en une formulation intégrale : validation d'un algorithme analogue
- 6.3 Passage d'une formulation intégrale à un algorithme : conception d'algorithmes non-analogues

CHAPITRE 6. FORMULATION INTÉGRALE

Chapitre 7

Techniques d'analyse

7.1 Calculs de sensibilité

Voir [1, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11].

7.2 Algorithmes à variance nulle

Voir [1, 8, 12].

CHAPITRE 7. TECHNIQUES D'ANALYSE

Chapitre 8

Monte Carlo, un outil didactique

CHAPITRE 8. MONTE CARLO, UN OUTIL DIDACTIQUE

Bibliographie

- J. Delatorre, G. Baud, J.J. Bézian, S. Blanco, C. Caliot, J.F. 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. *Solar Energy*, May 2013.
- [2] 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. *Journal* of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 125:57-68, April 2013.
- [3] V. Eymet, D. Poitou, M. Galtier, M. El Hafi, G. Terrée, and R. 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, June 2013.
- [4] P. Perez. Algorithmes de synthèse d'image et propriétés spectrales des gaz de combustion : Méthode de Monte-Carlo pour la simulation des transferts radiatifs dans les procédés à haute température. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- [5] A. de Guilhem de Lataillade. Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans des systèmes en combustion. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2001.
- [6] M. Roger. Modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de Monte-Carlo : illustrations en transfert radiatif. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- [7] J. De la Torre. Calculs de sensibilités par méthode de Monte-Carlo, pour la conception de procédés à énergie solaire concentrée. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2011.
- [8] J. Dauchet. Analyse radiative des photobioréacteurs. Thèse de Doctorat, Université Blaise Pascal, 2012.
- [9] O. Farges. Conception optimale de centrales solaires à concentration : application aux centrales à tour et aux installation "beam down". Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, 2014.
- [10] Maxime Roger, Stephane Blanco, Mouna El Hafi, and Richard Fournier. Monte carlo estimates of domaindeformation sensitivities. *Physical Review Letters*, 95(18):180601, 2005.
- [11] A de Lataillade, S Blanco, Y Clergent, J.L Dufresne, M El Hafi, and R Fournier. Monte Carlo method and sensitivity estimations. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 75(5):529–538, December 2002.
- [12] Jérémi 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, July 2012.