

N° d'ordre : 2343

THESE

présentée

pour l'obtention du diplôme de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Ecole doctorale : Transferts, Dynamique des fluides, Énergétique et Procédés
Spécialité : Énergétique et transferts

par

Maxime ROGER

**MODÈLES DE SENSIBILITÉ DANS LE CADRE DE LA MÉTHODE DE
MONTE-CARLO : ILLUSTRATIONS EN TRANSFERT RADIATIF**

Soutenue le 24 mai 2006 à 10^h00 devant le Jury composé de :

M JEAN-YVES GRANDPEIX	Univ. Jussieu Paris	Rapporteur
M PIERRE ESPIGAT	Collège de France	Rapporteur
M GILLES FLAMANT	PROMES Odeillo	Président
MME MOUNA EL HAFI	Ecole des Mines d'Albi-Carmaux	Examinateur
M RICHARD FOURNIER	Univ. P. Sabatier Toulouse	Examinateur
M RÉMI CARMINATI	Ecole Centrale Paris	Examinateur
M STÉPHANE BLANCO	Univ. P. Sabatier Toulouse	Invité
M MATHIAS PAULIN	Univ. P. Sabatier Toulouse	Invité

*Laboratoires d'accueil : Laboratoire de Génie des Procédés des Solides Divisés, Ecole des Mines Albi-Carmaux
- Laboratoire d'Energétique, Université Paul Sabatier Toulouse*

REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse n'aurait pu être possible sans l'aide et le soutien de nombreuses personnes que je tiens à remercier ici.

Pour commencer, je voudrais remercier Messieurs Jean-Yves Grandpeix et Pierre Espigat d'avoir accepter de rapporter cette thèse, et pour leurs retours enrichissants sur cette étude. Merci également à Gilles Flamant, Rémi Carminati et Mathias Paulin pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

Si ces années de thèse ont été si enrichissantes, c'est en grande partie grâce à l'équipe de travail dans laquelle s'est déroulé cette étude. Je voudrais donc remercier très spécialement Mouna, Stéphane et Richard. Grâce à votre soutien, vos idées et toutes ces discussions et échanges, j'ai pris beaucoup de plaisir à travailler avec vous. A ce merci, j'associe toute l'équipe des "rayonneux" : DJ David, Cyril, Vincent, Patrice, Arezki, Monique, Jean-Jacques, Julien et Nicolas. Et que cette équipe continue de se réunir au séminaire annuel de Roffiac !!

Je voudrais profiter de cette occasion pour remercier toutes les personnes rencontrées à l'EMAC et qui ont contribué à rendre ces années si plaisantes. Notamment mon collègue de bureau rayonneux Cyril, Petra, David, Souhila, Carlos, Cecilia, Carmen, Miguel, Rodrigo, Priscila, Mariem, Emeline, Naly, Nico, Romain, StepH, Marylin, Thomas, Jeff, Anne-C, Tegan... Un merci spécial à Marcio et Fabienne pour leur soutien permanent lors des derniers mois de thèse. J'ai une pensée aussi pour le personnel du laboratoire d'Energétique.

Un petit mot sur mes clubs de foot favoris qui ont animé plusieurs de mes week-end : la Jeunesse Sportive d'Ordan-Larroque (Gers) pour ces grands moments (pas spécialement de sport !) que ce club m'a fait vivre et le Toulouse Football Club (TFC) qui reste quoi qu'il arrive un sujet de conversation inépuisable.

Une grande pensée et un grand kélou pour mes chers potes du Gers : Cruz, Lulu, Tylv, Carraz, Labed, Kiki, Ben, Flo... et aussi pour mes potes de l'UPS Arnaud et Jeff.

Enfin je terminerai ces remerciements par ma famille, mon père et ma mère, Alex Jéré et Raphaël, mon frère Ol et Ana : merci pour tout.

RÉSUMÉ : Modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de Monte-Carlo : illustrations en transfert radiatif

En physique du transport, la méthode de Monte-Carlo est abordée comme une méthode de simulation numérique de phénomènes stochastiques. Cette approche permet une compréhension intuitive de la méthode grâce aux images statistiques de transport corpusculaire qui accompagnent habituellement le développement d'algorithmes. A partir de ce type d'algorithmes, nous proposons une démarche méthodologique permettant de développer une formulation intégrale de la grandeur estimée. Cette écriture intégrale permet notamment d'utiliser diverses techniques d'optimisation, essentiellement en vue d'une diminution des temps de calculs.

Une fois que l'intégrale est explicitée, nous proposons une méthodologie basée sur la méthode de Monte-Carlo permettant d'ajouter à un code existant des estimations de sensibilités pour un coût supplémentaire en temps de calcul relativement faible. Cette méthodologie s'applique à tous les types de sensibilités. Dans le cas de sensibilités à la déformation du domaine (sensibilité à un paramètre dont le domaine d'intégration est dépendant), un champ de vitesse de déformation du domaine est introduit de manière arbitraire. Les incertitudes statistiques associées aux estimations de sensibilités étant dépendantes du choix de ce champ de vitesse, nous proposons une technique systématique de construction d'un tel champ assurant une bonne qualité de convergence.

Cette méthodologie d'estimation simultanée de sensibilités a été évaluée en transfert radiatif sur des exemples académiques inspirés de problématiques courantes en imagerie médicale, en énergétique et en synthèse d'image. Chacun de ces exemples ayant une complexité algorithmique particulière, nous avons pu identifier les principales difficultés de mise en oeuvre dans le cadre du transport de photons et proposer une série de premières solutions effectives pour les surmonter.

ABSTRACT : Sensitivity models for Monte Carlo methods : illustrations in radiative transfer

In the frame of transport physics, the Monte Carlo method is considered as a numerical tool for simulation of stochastic phenomena. This approach allows an intuitive use of the Monte Carlo method following the statistical physics of corpuscular transport, leading to fast developments of suited algorithms. In this work, we propose a methodology that associates an integral formulation of the estimated quantities to any such intuitive Monte Carlo algorithm. The integral formulation makes it possible in particular to benefit from all available Monte Carlo optimization techniques.

Starting from the integral formulation, it is then shown that when a Monte Carlo algorithm is used for the estimation of any physical quantity A , a fast additional procedure can be implemented that simultaneously estimates the sensitivity of A to any problem parameter. When a change in the parameter changes the integration domain (domain-deformation sensitivities), a domain-deformation velocity field is required. The statistical uncertainties of the sensitivity estimations depend on the choice of this velocity field. Practically speaking, a systematic procedure is proposed here to design velocity fields that insure good convergence qualities.

The corresponding Monte Carlo methodology for sensitivity estimation has been tested on radiative transfer applications. Academic configurations related to current problems of medical imaging, energetics and computer graphics are presented. Different level of complexity arise from these academics examples and allow us to identify the main implementation difficulties leading us to the proposition of a series of first effective solutions for algorithmic implementation.

Table des matières

1	Introduction	9
2	Méthode de Monte-Carlo en transfert radiatif	13
2.1	Rappels de physique statistique : équation de Boltzmann et équation de transfert radiatif	13
2.1.1	Équation de Boltzmann	14
2.1.2	Émission, absorption et diffusion de photons	15
2.1.3	Établissement de l'équation de Transfert Radiatif à partir de l'équation de Boltzmann	17
2.1.4	ETR sous forme intégrale	24
2.2	Méthode de Monte-Carlo	26
2.2.1	Présentation de MMC par une approche analogue	27
2.2.2	Méthodes de Monte-Carlo pour le calcul intégral (MMC intégrales)	31
2.2.3	Liens entre l'approche analogue et l'approche intégrale	35
2.2.4	Quelques techniques d'optimisations de la méthode de Monte-Carlo	39
2.2.5	Exemples d'optimisation en transferts radiatifs	42
3	Calcul de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo	47
3.1	Calcul de sensibilités paramétriques par la méthode de Monte-Carlo	50
3.1.1	Principe du calcul simultané de sensibilités	51
3.1.2	Remarques	52
3.1.3	Influence de la formulation sur le calcul de sensibilité	54
3.2	Extension au calcul de sensibilités à la déformation du domaine	57
3.2.1	Principe	58
3.2.2	Discussion sur le choix de la vitesse de déformation et proposition d'une démarche systématique	61
3.3	Tests de mise en oeuvre du calcul de sensibilité au domaine	65
3.3.1	Trois exemples simples de mise en oeuvre	65
3.3.2	Travaux de formulation pour une application non triviale : la diffusion multiple	75
4	Mise en oeuvre dans le domaine des transferts radiatifs	87
4.1	Exemples d'applications du calcul de sensibilités paramétriques	88
4.2	Calcul de la sensibilité au temps d'un signal radiatif	93

4.2.1	Discussion sur les algorithmes de Monte-Carlo dans des problèmes instationnaires	94
4.2.2	Calcul de la sensibilité à t de $T(t)$ avec l'algorithme inverse	99
4.2.3	Résultats	100
4.3	Problèmes de type source-détecteur	100
4.3.1	Formulation intégrale de la transmission d'un signal radiatif depuis une source jusqu'à un détecteur	102
4.3.2	Algorithme de Monte-Carlo déduit de l'expression 4.3.1	104
4.3.3	Exemples	107
4.3.4	Discussion sur les estimations de sensibilités géométriques dans ce type de problème	110
4.4	Calcul de sensibilités à la déformation géométrique d'un système	112
4.4.1	Description de l'exemple	113
4.4.2	Écriture intégrale de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$	114
4.4.3	Algorithme de Monte-Carlo utilisé	115
4.4.4	Développement du calcul de la sensibilité $\partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$	117
5	Conclusions et perspectives	125
A	Choix du tirage aléatoire d'une position de diffusion	129
A.1	Première densité de probabilité	131
A.2	Deuxième densité de probabilité	131
A.3	Troisième densité de probabilité	132
B	Algorithme analogue testé dans un problème de type source-détecteur	135

Chapitre 1

Introduction

La présente étude s'est développée dans une équipe de recherche dont une des activités principales concerne la simulation numérique des transferts radiatifs par la méthode de Monte-Carlo (MMC). Cette thématique est commune à deux contextes scientifiques d'intérêt pour le laboratoire d'Energétique (LE) et le laboratoire de Génie des procédés des solides divisés (LGPSD) : – un contexte science pour l'ingénieur : on peut notamment citer deux thèses, celle d'Amaury de Lataillade[1] et celle de Patrice Pérez[2] qui ont porté sur l'étude de l'influence des transferts radiatifs infrarouges dans des systèmes en combustion.

– un contexte science atmosphérique : la thèse de Vincent Eymet[3] a eu pour objectif l'analyse des transferts radiatifs infrarouges dans des atmosphères planétaires (Terre, Mars et Vénus, collaboration avec le Laboratoire de Météorologie Dynamique) dans le but d'apporter des éléments de compréhension des mécanismes détaillés de l'effet de serre et de ses conséquences en termes de dynamique atmosphérique.

Dans chacune de ces études, d'importants codes de calcul numérique ont été développés pour tenir compte entre autres de la complexité spectrale des gaz (effet combiné de millions de raies d'absorption sur l'ensemble de l'infrarouge thermique), de la complexité géométrique des systèmes (chambres de combustion), des phénomènes de diffusion et de réflexion multiples, etc. Au fur et à mesure que les configurations physiques et géométriques se sont complexifiées, un besoin de plus en plus important d'accélération des temps de calcul s'est fait ressentir, ce qui a conduit l'équipe à mener une réflexion d'ordre méthodologique sur la méthode de Monte-Carlo. Plusieurs techniques d'optimisation de la méthode de Monte-Carlo ont ainsi été conçues au cours des dix dernières années¹ pour surmonter différentes difficultés de convergence des calculs de transferts radiatifs :

- dans des milieux quasi-isothermes[4, 5, 6],
- dans des milieux optiquement épais en absorption[7] et en diffusion[8],
- dans des géométries complexes[2] (où dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut de Recherche Informatique de Toulouse, Patrice Pérez s'est servi d'algorithme de synthèse d'image pour accélérer la simulation des transferts radiatifs infrarouges par MMC).

Parmi ces réflexions, une propriété de la méthode de Monte-Carlo a été plusieurs fois utilisée avec succès : la possibilité, à partir d'un algorithme de Monte-Carlo existant, d'ajouter un calcul de sensibilités pour un coût numérique supplémentaire relativement faible. Ces cal-

¹Nous discutons de certains de ces travaux dans le paragraphe 2.2.4 du chapitre 2

culs simultanés de sensibilités ont comme première conséquence de réduire significativement les temps nécessaires aux études paramétriques mais ils ont également permis le couplage (à l'aide d'extrapolations linéaires) des transferts radiatifs avec d'autres mécanismes physiques comme la conduction[4], la convection[9], la dynamique des fluides et la cinétique chimique[1]. Cette méthodologie de calcul de sensibilité a été formalisée dans [10] mais de nombreuses questions sont restées en suspens. Quelles sont les limites de son utilisation ? Dans [10], il est montré que cette méthodologie ne peut pas être appliquée à des paramètres dont le domaine d'intégration est dépendant² ; est-ce que cette difficulté peut être facilement contournée ? Est-il possible d'étendre son champ d'application à tous les types de paramètres ? Avec quels types d'algorithmes peut-on l'utiliser ? Quelles sont les difficultés de mise en oeuvre pratique et comment les surmonter ? etc.

C'est à ce type de questions que nous essaierons de répondre. Notre questionnement a donc pour origine des préoccupations concernant essentiellement la simulation numérique des transferts radiatifs, mais cela nous a rapidement conduit à des réflexions d'ordre méthodologique sur le calcul de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo dans un cadre général : notre contexte est particulier (celui du rayonnement ou plus généralement du transport linéaire), mais nous pensons que les réponses que nous proposerons peuvent avoir une résonance dans d'autres domaines scientifiques.

Le manuscrit est articulé autour d'une proposition théorique (au paragraphe 3.2 du chapitre 3), que nous présenterons sans lien spécifique avec le contexte radiatif. Dans la seconde partie du chapitre 3 (paragraphe 3.3), nous allons tester cette proposition sur divers exemples inspirés de problématiques courantes en rayonnement. Si ces tests proviennent du contexte radiatif, les conclusions et les questions théoriques qui en émergeront garderont un caractère de généralité. Ce ne sera par contre plus le cas du chapitre 4 où nous présenterons des applications académiques du calcul de sensibilités pensées en fonction de problématiques posées en rayonnement thermique. Il en va de même dans le chapitre 2, où nous présentons la méthode de Monte-Carlo dans le cadre de la simulation numérique des transferts radiatifs. Ce chapitre est donc essentiellement inspiré de notre pratique radiative, excepté au paragraphe 2.2.2 où nous décrivons la méthode selon une approche théorique générale.

Pour terminer cette brève partie introductory, j'aimerais alerter le lecteur sur l'état d'esprit qui a conduit à la réalisation de ce manuscrit. Il est clair que cette thèse aurait pu s'écrire de différentes façons en mettant en exergue tel ou tel message. J'ai fait un double choix :

- le premier concerne certainement la proposition théorique (cf paragraphe 3.2). Cette partie a évolué et mûri durant toute la thèse mais à aucun moment de ce manuscrit je ne présenterais la chronologie de cette évolution et les différentes étapes de généralisation. J'ai considéré cette partie comme assez mûre pour que la présentation soit synthétique et tout à fait générale. Probablement que cela rend plus ardue la lecture de ce passage dans un premier temps mais je considère cependant qu'il sera plus utile sous cette forme pour les utilisateurs de la méthode.

- le second choix concerne la mise en oeuvre. Cette fois-ci, la présentation est tout à fait différente. Il est évident que le niveau de généralité n'est absolument pas le même et que ma

²Nous verrons dans le chapitre 3 que cette méthodologie se base sur des écritures intégrales des grandeurs dont on cherche des sensibilités

réflexion s'est concentré sur un type d'application bien précis. J'ai pris alors le parti pris de ne pas concentrer le message sur l'application elle-même, mais plus de mettre en évidence ce que sont le type de travail et la méthodologie permettant de surmonter les difficultés de mise en œuvre. Probablement que ces parties sont moins abouties mais elles me semblent bien refléter ce qu'a été mon quotidien.

Chapitre 2

Méthode de Monte-Carlo dans le cadre de la simulation numérique des transferts radiatifs

Comme nous venons de le souligner, au cours de ce chapitre introductif et tout au long de ce manuscrit, nous allons présenter la méthode de Monte-Carlo et des développements méthodologiques sur cette méthode en nous appuyant sur des exemples illustratifs de calcul de transferts radiatifs. C'est pourquoi nous commençons par introduire brièvement quelques notions de physique statistique du transport linéaire dont nous aurons besoin ultérieurement dans ce manuscrit, en nous intéressant plus précisément au transport de photons. Nous aborderons ensuite la méthode de Monte-Carlo selon deux approches différentes : une première approche, dite analogue, qui consiste à se baser sur la description statistique des transferts radiatifs et une seconde approche, dite intégrale, qui consiste à considérer MMC comme une méthode numérique de calcul intégral. Cette seconde approche a une portée plus générale puisqu'elle ne nécessite pas une description stochastique des phénomènes étudiés et peut s'étendre à toutes les applications où le problème mathématique peut s'écrire en intégrale.

2.1 Rappels de physique statistique : équation de Boltzmann et équation de transfert radiatif

Nous introduisons dans ce paragraphe quelques notions de physique des transferts radiatifs dont nous nous servirons tout au long de cette étude. Dans le but de présenter par la suite la méthode de Monte-Carlo, nous choisissons de mettre en valeur l'aspect stochastique de la description physique du rayonnement thermique. Pour cela, nous commençons par présenter l'équation de Boltzmann à partir de laquelle nous déduirons l'équation des transferts radiatifs.

Ces rappels sont loin d'être exhaustifs, aussi pour une description plus complète, nous renvoyons aux ouvrages de référence en physique statistique[11] et en transferts radiatifs[12, 13, 14].

2.1.1 Équation de Boltzmann

Aussi appelée équation d'évolution de la fonction de distribution monoparticulaire $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$, l'équation de Boltzmann établit un bilan de conservation des particules dans un volume élémentaire de l'espace des phases $d\mathbf{r}d\mathbf{v} \in \mathbb{R}^6$. $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ représente le nombre moyen de particules qui, à l'instant t , ont une position dans un élément de volume $d\mathbf{r}$ centré en \mathbf{r} et une vitesse dans un élément de l'espace des vitesses $d\mathbf{v}$ centré en \mathbf{v} .

Il est possible à partir des hypothèses de la mécanique classique d'écrire l'équation d'évolution de la fonction de distribution monoparticulaire sous la forme [15] :

$$\partial_t f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + F_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = [\mathcal{C}] \quad (2.1.1)$$

où $F_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ est la somme des forces extérieures (forces autres que les interactions particulières). Le terme $\partial_t f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ décrit la variation de f en fonction du temps, $\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ est un terme de transport des particules, $F_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ traduit l'accélération des particules si celles-ci sont soumises à un champ de forces extérieures et $[\mathcal{C}]$ est le terme collisionnel.

Ce terme collisionnel traduit toutes les interactions, y compris les interactions à distance, entre les particules du système. Il s'écrit dans un cadre général à partir de la fonction de distribution à deux corps qui elle-même obéit à une équation dépendant de la fonction de distribution à trois corps, etc (hiérarchie BBGKY). On procède généralement à des simplifications en supposant que les collisions sont locales et quasi-instantanées et en négligeant toutes les corrélations entre particules. $[\mathcal{C}]$ s'écrit alors comme un terme source-puit représentant le nombre moyen de particules entrant ou sortant dans le volume de l'espace des phases $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ à l'instant t suite aux phénomènes de collision entre particules. On obtient ainsi l'équation de Boltzmann.

Remarque : échelles microscopique et macroscopique, modélisation mésoscopique
L'équation de Boltzmann correspond à une modélisation mésoscopique basée sur une description statistique du mouvement des particules à l'échelle microscopique.

Les états de chaque particule (ici la position et la vitesse de la particule) correspondent à l'état microscopique q ou micro-état du système dans un espace des phases à $6n$ dimensions (si on suppose le système composé de n particules). L'état macroscopique du système est alors décrit au moyen d'une loi de probabilité $p(q)$ sur l'espace des micro-états (que l'on appelle Ω). Ainsi une grandeur macroscopique \mathcal{A} est égale à la valeur moyenne à l'échelle macroscopique d'une observable microscopique A :

$$\mathcal{A} = \langle A \rangle_p = \sum_{q \in \Omega} A(q)p(q) \quad (2.1.2)$$

Lors d'une modélisation mésoscopique, on ne considère pas les états de chaque particule mais une distribution de ces états. Lors d'une modélisation macroscopique, on ne considère plus la distribution des vitesses des particules et on ne conserve plus que la distribution spatiale, les informations sur les vitesses se réduisant aux premiers moments de la distribution (communément la vitesse moyenne et la température). Les grandeurs macroscopiques se déduisent donc des grandeurs mésoscopiques par une intégration sur l'espace des vitesses. Par exemple, la densité de particules ρ est égale à :

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

ou encore le flux de particules \mathbf{J} est égal à :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v} v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

Ainsi, à partir de la fonction de distribution f , on peut déduire l'ensemble des grandeurs caractérisant l'état macroscopique du système.

2.1.2 Émission, absorption et diffusion de photons

Le rayonnement thermique correspond aux transferts de chaleur issus de la propagation de corpuscules de lumière appelés photons¹. Dans le but d'écrire par la suite le terme collisionnel de l'équation de Transfert Radiatif, décrivons dans un premier temps les interactions provoquant l'apparition ou la disparition de photons : l'émission, l'absorption et la diffusion.

Émission et absorption

Les émissions et absorptions de photons sont associées aux transitions d'une molécule d'un niveau énergétique à un autre. La fréquence du photon, absorbé ou émis, dépend de la différence entre ces niveaux d'énergie. Trois types d'interactions rayonnement-matière sont identifiés : l'émission spontanée, l'émission induite et l'absorption. Pour décrire chacun de ces phénomènes, considérons deux états moléculaires d'énergie E_1 et E_2 ($E_1 < E_2$). Lors de l'émission spontanée, la molécule transite de l'état E_2 à E_1 et émet un photon d'énergie $E_2 - E_1 = h\nu$ où $h = 6,626 \cdot 10^{-34} J.s$ est la constante de Planck. ν est la fréquence de l'onde électromagnétique correspondante. Lors de l'émission induite, un photon d'énergie $h\nu$ correspondant à l'écart énergétique entre E_1 et E_2 interagit avec une molécule occupant l'état E_2 et provoque l'émission d'un photon identique d'énergie $h\nu$. Lors de l'absorption, le photon d'énergie $h\nu$ interagit avec une molécule occupant l'état E_1 qui va transiter vers l'état E_2 tandis que le photon disparaît (voir figure 2.1).

Coefficient d'absorption k_{av} Si on considère le trajet d'un photon de fréquence ν , la probabilité pour que ce photon soit absorbé sur une distance élémentaire dl autour du point \mathbf{r} est $k_{av}(\mathbf{r})dl$. Le coefficient d'absorption $k_{av}(\mathbf{r})$ s'exprime en m^{-1} , il est égal à l'inverse du libre parcours moyen d'absorption (distance moyenne que parcourt un photon avant d'être absorbé) du photon dans le volume élémentaire $d\mathbf{r}$ autour de \mathbf{r} . k_{av} dépend de la fréquence ν , des concentrations en gaz et en particules, de la température et de la pression en \mathbf{r} .

Hypothèse d'équilibre thermodynamique local Sous cette hypothèse, on admet qu'en tout point \mathbf{r} d'un milieu semi-transparent, les propriétés thermodynamiques locales, c'est-à-dire dans un volume élémentaire $d\mathbf{r}$, sont les mêmes que lorsque ce volume élémentaire est plongé dans un milieu à l'équilibre thermodynamique. Une conséquence de cette hypothèse est que l'on va pouvoir considérer l'émission au point \mathbf{r} comme égale à ce que serait son absorption

¹Le rayonnement thermique peut être considéré sous deux aspects : l'aspect corpusculaire qui décrit le rayonnement thermique par le transport de photons et l'aspect ondulatoire qui le décrit comme la propagation d'ondes électromagnétiques. Cette dualité trouve son explication dans la théorie quantique où les aspects corpusculaires et ondulatoires du rayonnement sont inséparables[16]

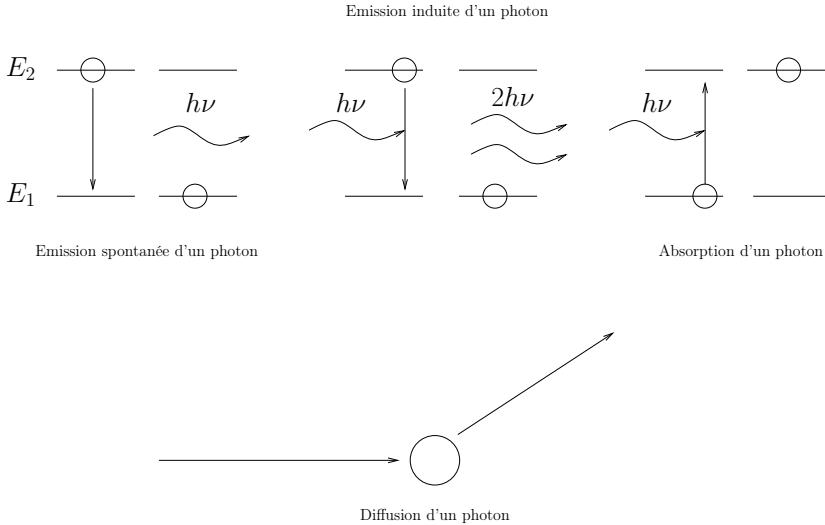


FIG. 2.1 – Représentation schématique des phénomènes d'émission, d'absorption et de diffusion de photons

dans une cavité fermée à l'équilibre. Ainsi, le coefficient d'absorption va aussi être utilisé pour caractériser l'émission d'un volume de gaz comme nous le verrons ultérieurement lorsque nous présenterons le terme collisionnel de l'ETR.

Remarque Le spectre d'absorption (ou d'émission) d'un gaz peut être représenté par les variations de k_{av} en fonction de ν . Dans les contextes applicatifs qui motivent cette étude, ce spectre² est généralement très compliqué à modéliser car très irrégulier. De nombreux modèles de spectres de gaz ont alors été proposés[17]. La présentation de ces modèles sortant du cadre de cette étude, nous ne citerons rapidement que le modèle “raie-par-raie” qui est une référence en terme de précision.

Une raie d'absorption caractérise les phénomènes d'absorption correspondant à une transition énergétique d'une molécule. Cette transition énergétique ne correspond pas à une fréquence unique ν mais à une distribution des fréquences en raison des phénomènes d'élargissement de raies (élargissement collisionnel, naturel et par effet Doppler). Une raie représente cette distribution : une raie i d'une espèce k est caractérisée par son profil de raie $F_{i,k}(\nu - \nu_{ci})$ où ν_{ci} est la position du centre de la raie. Ce profil de raie dépend des conditions thermophysiques du gaz. Dans le chapitre suivant (paragraphe 3.3.1), à des fins méthodologiques, nous traiterons un cas où une couche est constituée d'un gaz, supposé avoir un spectre composé d'une seule et unique raie. Cette raie est alors modélisée par un profil de Lorentz de la forme suivante :

$$F_{i,k}(\nu - \nu_{ci}) = \frac{\delta_i}{\pi[(\nu_i - \nu_{ci})^2 + \delta_i^2]} \quad (2.1.3)$$

où δ_i est la demi-largeur à mi-hauteur de la raie.

Un spectre est constitué d'un très grand nombre de raies. Le modèle “raie-par-raie” reconstruit ce spectre d'absorption d'un gaz ou d'un mélange de gaz en déterminant le coefficient

²Lors de l'étude du rayonnement thermique, les spectres étudiés sont compris entre 0,1 et 100 μm incluant une partie du domaine ultraviolet, le domaine visible et le domaine infrarouge (domaine où les échanges radiatifs sont le plus important en combustion et en météorologie)

d'absorption à la fréquence ν par le recouvrement de l'ensemble des raies :

$$k_{a\nu} = \sum_{k=1}^{N_{\text{espèces}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{raies}}} \frac{X_k P}{k_B T} S_{i,k} F_{i,k}(\nu - \nu_{ci}) \quad (2.1.4)$$

où $X_k P$ est la pression partielle de l'espèce k et $S_{i,k}$ est l'intensité de la raie i de l'espèce k ($S_{i,k}$ représente l'intégrale sur tout le spectre de la contribution de la raie au coefficient d'absorption)

Diffusion du rayonnement

Le phénomène de diffusion du rayonnement est provoqué par un autre type d'interaction entre un photon et une molécule. Cette interaction se traduit par une déviation du photon de sa trajectoire initiale (voir la figure 2.1). Dans ce manuscrit, nous supposerons la diffusion élastique (l'énergie du photon et donc sa fréquence reste inchangée).

Coefficient de diffusion $k_{d\nu}$ De manière analogue au coefficient d'absorption, la probabilité de diffusion d'un photon d'énergie $h\nu$ sur une distance élémentaire dl autour de \mathbf{r} est $k_{d\nu}(\mathbf{r})dl$. Ce coefficient s'exprime aussi en m^{-1} et est égal à l'inverse du libre parcours moyen de diffusion (distance moyenne que parcourt un photon entre deux diffusions successives) du photon dans le volume élémentaire $d\mathbf{r}$ autour de \mathbf{r} . $k_{d\nu}(\mathbf{r})$ dépend de la fréquence, de la concentration et des propriétés optiques des particules en suspension dans le milieu, de la température et de la pression.

Fonction de phase $\Phi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_2)$ La fonction de phase décrit la distribution directionnelle des photons provenant de la direction \mathbf{u}_1 et diffusés au point \mathbf{r} . $\Phi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_2)$ dépend de la fréquence et des propriétés optiques des particules. Au cours des applications traitées dans cette étude, la diffusion sera souvent supposé isotrope. Sous cette hypothèse, la fonction de phase s'écrit :

$$\Phi = \frac{1}{4\pi} \quad (2.1.5)$$

Dans le cadre d'applications où l'hypothèse d'isotropie n'est plus valable, on peut citer la fonction d'Henyey-Greenstein[18] qui est communément utilisée pour modéliser la fonction de phase lors d'applications de types atmosphériques[19] ou biomédicales[20].

2.1.3 Établissement de l'équation de Transfert Radiatif à partir de l'équation de Boltzmann

Nous allons maintenant établir à partir de l'équation 2.1.1 l'équation de Transfert Radiatif. Il faut noter que dans le cas du transport de photons, l'espace des phases est un espace à cinq dimensions si l'indice de réfraction du milieu de propagation est constant. Cet espace des phases est alors composé des trois dimensions spatiales $\mathbf{r}(x, y, z)$ et de deux dimensions directionnelles $\mathbf{u}(\theta, \phi)$ (\mathbf{u} représente la direction de propagation des photons). La vitesse de la lumière c est supposée égale à $\frac{c_0}{n}$ (où c_0 est la vitesse de la lumière dans le vide et n l'indice de réfraction du milieu de propagation). Ceci revient à inclure dans la vitesse de propagation les effets de retard liés à la diffusion ce qui permet de négliger la diffusion moléculaire et de ne considérer que la

diffusion par des inhomogénéités ou par des particules. Le module de la vitesse de la lumière étant constante, seules deux dimensions sont nécessaires pour définir l'espace des vitesses³. L'équation d'évolution de la fonction de distribution des photons de fréquence ν , $f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$, s'écrit alors :

$$\partial_t f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) + c\mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = [\mathcal{C}]_\nu \quad (2.1.6)$$

où nous avons supprimé le terme d'accélération des particules de l'équation 2.1.1 et où c est la vitesse de propagation des photons dans le milieu considéré.

Nous avons vu précédemment que si on néglige les corrélations entre particules et si on suppose que les collisions sont locales et quasi-instantanées, le terme collisionnel de l'équation de Boltzmann est un terme source-puit tenant compte de l'apparition et de la disparition des particules dans un volume de l'espace des phases $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ suite aux diverses interactions que subissent ces particules. Dans le cas des photons, nous gardons ces hypothèses et nous allons écrire le terme collisionnel en sachant que les interactions provoquant la "disparition" ou la "création" de photons sont l'émission, l'absorption et la diffusion. Mais avant d'exprimer les termes correspondant à ces interactions, commençons par introduire la luminance, grandeur mésoscopique utilisée pour décrire le transport des photons, que l'on relie facilement à la fonction de distribution f .

Luminance

La grandeur mésoscopique décrivant le rayonnement en un point de l'espace des phases est généralement la luminance plutôt que la fonction de distribution. La luminance monochromatique $L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ au point \mathbf{r} , dans la direction \mathbf{u} et à l'instant t s'exprime en $W.m^{-2}.str^{-1}.Hz^{-1}$. C'est une puissance par unité de surface normale à la direction \mathbf{u} , par unité d'angle solide et par unité de fréquence. Si on raisonne en modèle monochromatique, la quantité de chaleur δQ qui traverse pendant dt la surface dS_\perp (surface perpendiculaire à \mathbf{u}) dans la direction \mathbf{u} s'écrit :

$$\delta Q = L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) dt d\mathbf{u} dS_\perp \quad (2.1.7)$$

$f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{u}$ représente le nombre moyen de photons de fréquence ν par unité de volume de l'espace des phase et δQ est aussi égale au nombre de photons $f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \frac{c_0}{n} dt dS_\perp$ de fréquence ν présents dans le volume $dS_\perp \frac{c_0 dt}{n}$ (voir figure 2.2) et se propageant dans la direction \mathbf{u} , multiplié par l'énergie de chaque photons $h\nu$ soit :

$$\delta Q = f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \frac{c_0}{n} dt d\mathbf{u} dS_\perp h\nu \quad (2.1.8)$$

On relie ainsi facilement la luminance et la fonction de distribution :

$$L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \frac{c_0}{n} h\nu \quad (2.1.9)$$

L'équation 2.1.6 s'écrit alors :

$$\frac{1}{c} \partial_t L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = [\mathcal{C}] \quad (2.1.10)$$

³Dans les applications qui nous intéressent, les collisions sont supposées élastiques, c'est-à-dire que la fréquence du photon reste inchangée. Il n'est pas nécessaire d'inclure la fréquence du photon comme dimension supplémentaire dans cet espace des phases

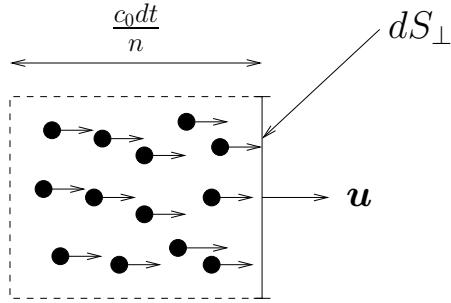


FIG. 2.2 – La quantité d'énergie δQ qui traverse la surface dS_{\perp} pendant dt est égale au nombre de photons se propageant dans la direction \mathbf{u} dans le volume $\frac{c_0}{n} dt dS_{\perp}$ multiplié par l'énergie de chaque photon.

Écriture du terme de “disparition” de photons

La disparition de photons du volume de l'espace des phases $d\mathbf{r}d\mathbf{u}$ est provoquée par les phénomènes d'absorption et de diffusion sortante. En considérant qu'un photon ne peut pas interagir avec un autre photon et en supposant qu'il existe toujours une échelle en dessous de laquelle les lieux d'interactions possibles sont distribués spatialement aléatoirement de façon uniforme, ce terme de disparition des photons est alors linéaire et s'écrit sous la forme : $-k_{\nu}(\mathbf{r})L_{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ où $k_{\nu}(\mathbf{r}) = k_{av}(\mathbf{r}) + k_{dv}(\mathbf{r})$ est le coefficient d'extinction. Pour comprendre précisément ce terme d'un point de vue statistique, rappelons les images physiques associées à la loi de Beer-Lambert :

Atténuation exponentielle et absence de mémoire : loi de Beer-Lambert Considérons un photon en \mathbf{r} , à l'instant t se déplaçant dans la direction \mathbf{u} . On note σ la distance que parcourt ce photon entre l'instant t et l'instant de sa prochaine interaction avec la matière. $p_{\Sigma}(\sigma)d\sigma$ est la probabilité pour qu'une interaction ait lieu entre σ et $\sigma + d\sigma$. $p_{\Sigma}(\sigma)$ est définie sur \mathbb{R}^+ . On note $T(l)$ la probabilité que σ soit supérieur à une distance l :

$$T_{\mathbf{r}, \mathbf{u}, t}(l) = \int_l^{+\infty} p_{\Sigma}(\sigma)d\sigma \quad (2.1.11)$$

On s'intéresse alors à la probabilité que σ soit supérieur à $l_1 + l_2$:

$$T_{\mathbf{r}, \mathbf{u}, t}(l_1 + l_2) = T_{\mathbf{r}, \mathbf{u}, t}(l_1) \times \mathcal{T}(l_2|l_1) \quad (2.1.12)$$

où $\mathcal{T}(l_2|l_1)$ est la probabilité conditionnelle que le photon parcourt encore une distance l_2 sans interaction, sachant qu'il a parcouru une distance l_1 sans interaction depuis \mathbf{r} . L'hypothèse d'une distribution aléatoire des lieux d'interactions permet d'affirmer qu'il n'y a aucune corrélation statistique entre ce qui advient au corpuscule à partir de l_2 et ce qui est advenu précédemment. C'est l'équivalent d'une absence de mémoire. Ainsi, $\mathcal{T}(l_2|l_1)$ n'est fonction que de l_2 :

$$T_{\mathbf{r}, \mathbf{u}, t}(l_1 + l_2) = T_{\mathbf{r}, \mathbf{u}, t}(l_1)T_{\mathbf{r}_1, \mathbf{u}, t_1}(l_2) \quad (2.1.13)$$

où $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + l_1 c \mathbf{u}$ et $t_1 = t + \frac{l_1}{c}$. Si on suppose que le milieu est uniforme et sans évolution temporelle alors les probabilités d'interaction sont identiques pour deux particules de même vitesse en (\mathbf{r}, t) et (\mathbf{r}_1, t_1) . On peut donc écrire :

$$T_{\mathbf{r}_1, \mathbf{u}, t_1}(l_2) = T_{\mathbf{r}, \mathbf{u}, t}(l_2) \quad (2.1.14)$$

La fonction $T_{\mathbf{r},\mathbf{v},t}$ vérifie donc la propriété suivante :

$$T_{\mathbf{r},\mathbf{u},t}(l_1 + l_2) = T_{\mathbf{r},\mathbf{u},t}(l_1)T_{\mathbf{r},\mathbf{u},t}(l_2) \quad (2.1.15)$$

Elle est donc de forme exponentielle et les contraintes $T_{\mathbf{r},\mathbf{u},t}(0) = 1$ et $T_{\mathbf{r},\mathbf{u},t}(l) \leq 1$ conduisent à :

$$T_{\mathbf{r},\mathbf{u},t}(l) = \exp\left(-\frac{l}{a}\right) \quad (2.1.16)$$

où a est un paramètre positif. En reportant cette expression dans l'équation 2.1.11 et en dérivant par rapport à l , on obtient la densité de probabilité du libre parcours l sous la forme

$$p_\Sigma(\sigma) = \frac{1}{a} \exp\left(-\frac{\sigma}{a}\right) \quad (2.1.17)$$

En notant λ le libre parcours moyen du photon, la contrainte suivante est imposée :

$$\int_0^{+\infty} \sigma p_\Sigma(\sigma) d\sigma = \int_0^{+\infty} \frac{\sigma}{a} \exp\left(-\frac{\sigma}{a}\right) d\sigma = \lambda \quad (2.1.18)$$

qui nous conduit à :

$$a = \lambda \quad (2.1.19)$$

On obtient donc sous l'hypothèse d'un milieu homogène et temporellement invariant :

$$\begin{aligned} T(l) &= \exp\left(-\frac{l}{\lambda}\right) \\ p_\Sigma(\sigma) &= \frac{1}{\lambda} \exp\left(-\frac{\sigma}{\lambda}\right) \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

Si le milieu est purement absorbant (sans diffusion), le coefficient d'absorption est égal à l'inverse du libre parcours moyen et l'équation 2.1.20 peut s'écrire :

$$\begin{aligned} T(l) &= \exp(-k_{a\nu}l) \\ p_\Sigma(\sigma) &= k_{a\nu} \exp(-k_{a\nu}\sigma) \end{aligned} \quad (2.1.21)$$

Si maintenant le milieu est purement diffusif (sans absorption) :

$$\begin{aligned} T(l) &= \exp(-k_{d\nu}l) \\ p_\Sigma(\sigma) &= k_{d\nu} \exp(-k_{d\nu}\sigma) \end{aligned} \quad (2.1.22)$$

Ces équations se généralisent sans difficulté à un milieu hétérogène, absorbant et diffusant (toujours temporellement invariant) par

$$\begin{aligned} T(l) &= \exp\left(-\int_0^l k_\nu(\sigma) d\sigma\right) \\ p_\Sigma(\sigma) &= k_\nu \exp\left(-\int_0^\sigma k_\nu(\sigma) d\sigma\right) \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

où $k_\nu = k_{a\nu} + k_{d\nu}$ est appelé le coefficient d'extinction. L'équation 2.1.23 est la loi de Beer-Lambert⁴, $p_\Sigma(\sigma)d\sigma$ étant la probabilité que le photon subisse une extinction (par absorption ou par diffusion) entre les distances σ et $\sigma + d\sigma$.

Ainsi, si on considère l'équation 2.1.6 dans laquelle on suppose qu'il n'y a pas de source de photons et que le milieu est sans évolution temporelle, la loi de Beer nous donne la valeur de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ suivante :

$$L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = \exp \left(- \int_0^l k_\nu(\sigma) d\sigma \right) L_\nu(\mathbf{r}_0, \mathbf{u}, t_0) \quad (2.1.24)$$

avec $l = c(t - t_0)$ et $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + c\mathbf{u}(t - t_0)$ et $t_0 = t - \frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0\|}{c}$. Cette dernière équation est solution de l'équation différentielle suivante :

$$\frac{1}{c} \partial_t L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = -k_\nu(\mathbf{r}) L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \quad (2.1.25)$$

où l'on retrouve le terme de disparition des photons $-k_\nu(\mathbf{r}) L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ ou $-(k_{a\nu}(\mathbf{r}) + k_{d\nu}(\mathbf{r})) L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ du terme collisionnel

Écriture du terme source

La création de photons dans $d\mathbf{r}d\mathbf{u}$ est dûe à l'émission de photons et à la diffusion entrante.

L'émission de photons dépend des propriétés thermodynamiques locales du milieu de propagation. Pour la modéliser au sein d'un volume élémentaire $d\mathbf{r}d\mathbf{u}$ de l'espace des phases, on se place dans une condition d'équilibre à une température T . A l'équilibre, la luminance est uniforme, isotrope et est donnée par la loi de Planck (on parlera de luminance de Planck ou de luminance noire) :

$$L_\nu^0(T) = 2 \frac{h\nu^3}{c^2 \left[e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1 \right]} \quad (2.1.26)$$

où $k_B = 1,3805 \cdot 10^{-23} J.K^{-1}$ est la constante de Boltzmann et $c_0 = 2,99792 \cdot 10^8 m.s^{-1}$ la vitesse de la lumière dans le vide. La condition d'équilibre impose également que les termes collisionnels d'absorption et d'émission se compensent exactement. Avec ce qui précède, la luminance étant égale à $L_\nu^0(T)$, le terme d'absorption est $-k_{a\nu} L_\nu^0(T)$. On en conclue donc que le terme d'émission est $+k_{a\nu}(\mathbf{r}) L_\nu^0(T)$. Mais à ce stade, ce modèle d'émission ne vaut que pour une condition d'équilibre. C'est là qu'intervient l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local permettant de conserver ce modèle dans des configurations hors équilibre en remplaçant la température T par la température locale $T(\mathbf{r})$. On retient donc que la contribution de l'émission au terme collisionnel est $+k_{a\nu}(\mathbf{r}) L_\nu^0(T(\mathbf{r}))$.

Le terme de diffusion entrante représente l'ensemble des diffusions vers \mathbf{u} ayant lieu dans le volume $d\mathbf{r}$. Ce terme s'écrit : $k_{d\nu}(\mathbf{r}) \int_{4\pi} d\mathbf{u}' \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u}) L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t)$. Le produit $k_{d\nu}(\mathbf{r}) L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t)$

⁴Dans la suite de ce chapitre, nous allons présenter la méthode de Monte-Carlo en nous basant sur une description statistique du transport de photons. Par exemple, nous utiliserons la fonction de phase en l'interprétant comme la densité de probabilité de la direction de diffusion sur la sphère unité. De même, nous utiliserons régulièrement les lois de Beer-Lambert et de Lambert pour définir respectivement les densités de probabilité d'extinction et les densités de probabilité de direction d'incidence d'un rayonnement isotrope à la frontière du système.

traduit l'occurrence d'évènements de diffusion pour les photons se propageant dans la direction \mathbf{u}' et $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u})$ traduit la probabilité qu'une telle diffusion conduise à l'apparition d'un photon dans la direction \mathbf{u} . L'intégrale sur 4π permet de tenir compte des diffusions vers \mathbf{u} de photons provenant de toutes les directions.

Écriture de l'ETR

Le terme collisionnel $[\mathcal{C}]_\nu$ pour des photons de fréquence ν s'écrit finalement :

$$[\mathcal{C}]_\nu = -(k_{a\nu}(\mathbf{r}) + k_{d\nu}(\mathbf{r}))L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) + k_{a\nu}(\mathbf{r})L_\nu^0(\mathbf{r}, t) + k_{d\nu}(\mathbf{r}) \int_{4\pi} d\mathbf{u}' \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u})L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t) \quad (2.1.27)$$

L'ETR sous forme différentielle est alors :

$$\frac{1}{c}\partial_t L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla L(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = -(k_{a\nu}(\mathbf{r}) + k_{d\nu}(\mathbf{r}))L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) + k_{a\nu}(\mathbf{r})L_\nu^0(\mathbf{r}, t) + k_{d\nu}(\mathbf{r}) \int_{4\pi} d\mathbf{u}' \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u})L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}', t) \quad (2.1.28)$$

où $L_\nu^0(\mathbf{r}, t)$ est la luminance noire au point \mathbf{r} à l'instant t . Les conditions aux limites se définissent aux bords du système, généralement une paroi (réelle ou virtuelle), localement plane, noire ou réfléchissante. En un point \mathbf{r}_w situé à la paroi, la luminance s'exprime par :

$$L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t) = \epsilon(\mathbf{r}_w, \mathbf{u})L_\nu^0(\mathbf{r}_w) + \int_{2\pi} d\mathbf{u}' \rho(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u})L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}', t) \quad (2.1.29)$$

où $\epsilon(\mathbf{r}_w, \mathbf{u})$ est le coefficient d'émissivité directionnel au point \mathbf{r}_w . $\rho(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u})$ est le coefficient de réflectivité directionnel au point \mathbf{r}_w , correspondant à la fraction de la luminance provenant de la direction \mathbf{u}' qui est réfléchie dans la direction \mathbf{u} (équivalent de la fonction de phase pour une surface).

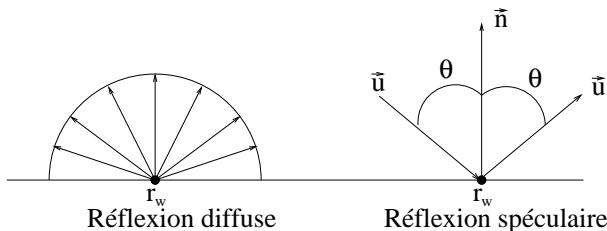


FIG. 2.3 – Représentation des réflexions spéculaires et des réflexions diffuses sur une surface

Si la paroi est purement spéculaire, la réflexion obéit aux lois de Snell-Descartes (voir la figure 2.3). Si la paroi est diffuse, la réflexion obéit à la loi de Lambert :

$$\rho(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u}) = \frac{\mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}}{\pi} (1 - \epsilon(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}')) \quad (2.1.30)$$

Méthodes numériques de résolution de l'ETR De nombreuses méthodes de résolution numérique ont été développées pour résoudre l'ETR. Des hypothèses simplificatrices telle que la stationnarité (régulièrement utilisée car les échanges radiatifs sont souvent beaucoup plus rapides que les échanges par d'autres modes de transfert d'énergie), la non prise en compte de certains phénomènes physiques ou la simplification des propriétés spectrales des milieux de propagations permettent le développement de nouveaux modèles radiatifs et de nouvelles méthodes numériques plus efficaces. Par exemple, l'ETR est à l'origine de l'équation du rendu[21] (où les phénomènes d'absorption et de diffusion sont négligés), et qui est généralement bien adaptée aux problématiques posées en synthèse d'image. Dans d'autres contextes tel que l'étude des transferts radiatifs dans des systèmes en combustion, les phénomènes de diffusions peuvent être négligés si les fractions volumiques et le diamètre des particules en suspension dans le milieu (comme les suies par exemples) sont faibles[22, 23] ce qui réduit très significativement le niveau de difficulté.

Parmi les méthodes numériques résolvant l'ETR sous sa forme différentielle, on peut citer les méthodes aux ordonnées discrètes (DOM) introduite par Chandrasekhar[24]. Les DOM sont basées sur une discréttisation de l'espace des directions et une discréttisation spatiale (type volumes finis) de l'ETR. Sa rapidité et sa précision satisfaisante dans de nombreuses configurations[25] en font une des méthodes les plus utilisées. On peut citer à titre d'exemples des travaux récents associés à cette méthode[26] proposant des solutions effectives pour le couplage avec des codes de dynamique des fluides. Cependant, la discréttisation angulaire reste un problème sous certaines conditions induisant des erreurs numériques comme "l'effet de rayon"[26]. Quant à la discréttisation spatiale, il est connu qu'elle induit de la diffusion numérique. De plus, les DOM deviennent coûteuse en temps de calcul lorsque l'on doit tenir compte de manière précise des propriétés spectrales des gaz, ou des phénomènes de diffusion et de réflexions multiples.

On peut aussi citer la méthode aux harmoniques sphériques introduite par Jeans[27] (pour l'étude des transferts radiatifs en astrophysique) ou méthode P_N , régulièrement utilisée pour résoudre l'ETR, qui est basée sur une décomposition en harmoniques sphériques de la luminance. Le nombre N détermine l'ordre de l'approximation. Le premier niveau d'approximation, P_1 , est couramment utilisé et donne des résultats précis pour de fortes épaisseurs optiques. Les niveaux d'approximations supérieurs permettent de traiter des milieux plus minces et de mieux rendre compte des distributions angulaires à la paroi[28].

Une autre catégorie de méthodes consiste à résoudre l'ETR sous sa forme intégrale. Parmi celles-ci, la méthode du lancer de rayon est basée sur une discréttisation de l'espace des directions[14]. Pour chaque direction, le principe consiste à découper le rayon en segments supposés homogènes et isothermes pour lesquels on calcule une transmittivité moyenne. Cette méthode devient rapidement coûteuse en temps de calcul quand on considère les phénomènes de diffusions et de réflexions multiples.

La méthode de Monte-Carlo fait partie de cette catégorie de méthodes résolvant l'ETR sous sa forme intégrale que nous présentons maintenant.

2.1.4 ETR sous forme intégrale

On note $\mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j)$ la fraction d'énergie transmise sans diffusion du point \mathbf{r}_i jusqu'au point \mathbf{r}_j :

$$\mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j) = \exp \left(- \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} (k_{a\nu} + k_{d\nu}) d\mathbf{r} \right) \quad (2.1.31)$$

Les points notés $\mathbf{r}_w, \mathbf{r}_{w1}, \dots$ sont sur la frontière du système (voir figure 2.4).

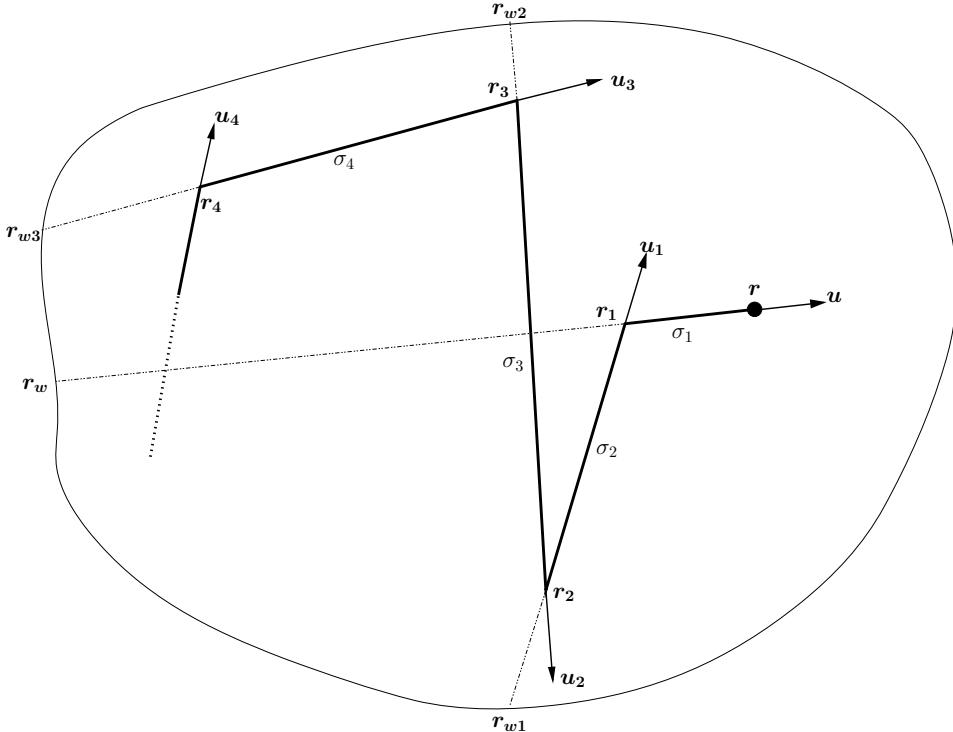


FIG. 2.4 – Représentation des notations utilisées lors de l'expression 2.1.33 de l'ETR sous sa forme intégrale

Vocabulaire choisi Au cours de ce manuscrit, nous distinguerons la transmittivité et la transmittance. Nous appellerons transmittivité \mathcal{T}_ν la grandeur que nous venons de définir. Nous appellerons transmittance (que nous noterons T) la fraction d'énergie totale transmise entre deux éléments géométriques, avec ou sans diffusion⁵.

L'ETR sous forme intégrale s'écrit :

$$L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t_w) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_w \rightarrow \mathbf{r}) + \int_0^{||\mathbf{r}-\mathbf{r}_w||} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}) \left\{ k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_1, t_1) + k_{d\nu} \int_{4\pi} \phi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}) L_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, t_1) d\Omega(\mathbf{u}_1) \right\} \quad (2.1.32)$$

où $\sigma_1 = ||\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}||$ est l'abscisse curviligne du point $\mathbf{r}_1 \in [\mathbf{r}_w, \mathbf{r}]$. Le terme $L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t_w) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_w \rightarrow \mathbf{r})$ décrit la luminance émise ou/et réfléchie depuis \mathbf{r}_w à l'instant $t_w = t - \frac{||\mathbf{r}-\mathbf{r}_w||}{c}$ et transmise

⁵Lorsque l'on considère un milieu purement absorbant, ces deux grandeurs sont égales

sans diffusion jusqu'à \mathbf{r} . $k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_1, t_1) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r})$ décrit la luminance émise au point \mathbf{r}_1 à l'instant t_1 et transmise sans diffusion jusqu'à \mathbf{r} à l'instant t et $\mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}) k_{d\nu} \int_{4\pi} \phi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}) L_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, t_1) d\Omega(\mathbf{u}_1)$ décrit la luminance provenant de la direction \mathbf{u}_1 , diffusée en \mathbf{r}_1 vers \mathbf{u} et transmise jusqu'à \mathbf{r} . Après développement de la luminance $L_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, t_1)$, on obtient l'expression suivante⁶ :

$$\begin{aligned} L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = & L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t_w) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_w \rightarrow \mathbf{r}) + \int_0^{||\mathbf{r}-\mathbf{r}_w||} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}) \left\{ k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_1, t_1) \right. \\ & + k_{d\nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}) \left\{ L_\nu(\mathbf{r}_{w1}, \mathbf{u}_1, t_{w1}) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_{w1} \rightarrow \mathbf{r}_1) + \right. \\ & \left. \int_0^{||\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_{w1}||} d\sigma_2(\mathbf{r}_2) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1) \left\{ k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_2, t_2) + k_{d\nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}_2 \phi_\nu(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_2 \rightarrow \mathbf{u}_1) \left\{ \right. \right. \right. \\ & L_\nu(\mathbf{r}_{w2}, \mathbf{u}_2, t_{w2}) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_{w2} \rightarrow \mathbf{r}_2) + \int_0^{||\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_{w2}||} d\sigma_3(\mathbf{r}_3) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_3 \rightarrow \mathbf{r}_2) \left\{ k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_3, t_3) \right. \\ & \left. \left. \left. + \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.1.33)$$

où $t_{wi}|_{\{i \in \mathbb{N}^{*+}\}}$ est égal à :

$$t_{wi} = t - \frac{||\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|| + ||\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|| + \dots + ||\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{wi}||}{c}$$

$t_{wi}|_{\{i \in \mathbb{N}^{*+}\}}$ est l'instant où une émission et/ou réflexion ont lieu depuis le point \mathbf{r}_{wi} situé sur une frontière du système. \mathbf{r}_{wi} est l'intersection de la demi-droite partant du point \mathbf{r}_i dans la direction $-\mathbf{u}_i$ (voir figure 2.4). La luminance à la frontière du système $L_\nu(\mathbf{r}_{wi}, \mathbf{u}, t_{wi})$ est donnée par l'équation 2.1.29. $t_i|_{\{i \in \mathbb{N}^{*+}\}}$ est l'instant d'émission au point $\mathbf{r}_i|_{\{i \in \mathbb{N}^{*+}\}}$:

$$t_i = t - \frac{||\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|| + ||\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|| + \dots + ||\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i||}{c}$$

Remarque $L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ peut aussi s'écrire sous la forme suivante :

$$L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = \int_{\Gamma_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)} d\gamma k_{a\nu}(\mathbf{r}_\gamma) L_\nu^0(\mathbf{r}_\gamma, t_\gamma) \exp(-\tau_\gamma) \quad (2.1.34)$$

où $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ est l'espace des chemins optiques incidents au point \mathbf{r} , dans la direction \mathbf{u} et à l'instant t . τ_γ est l'épaisseur optique du milieu traversé par γ :

$$\tau_\gamma = \int_0^{l_\gamma} (k_{a\nu} + k_{d\nu}) dl \quad (2.1.35)$$

où l_γ est la distance totale parcourue par le chemin optique γ émis au point \mathbf{r}_γ à l'instant $t_\gamma = t - \frac{l_\gamma}{c}$ et transmis à l'instant t au point \mathbf{r} dans la direction \mathbf{u} . Ce type d'écriture est présenté de façon plus détaillée dans la thèse d'A. de Lataillade[1].

Dans l'expression 2.1.33 de l'ETR, l'espace des chemins optiques est décomposé en sous-espaces de chemins optiques ayant le même nombre de diffusions : la luminance est égale à une

⁶Dans cette expression, la notation $d\mathbf{u}_i$ est équivalente à $d\Omega(\mathbf{u}_i)$.

somme de termes dont chacun décrit la contribution d'un de ces sous-espaces. Par exemple, le terme

$$L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t_w) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_w \rightarrow \mathbf{r}) + \int_0^{||\mathbf{r} - \mathbf{r}_w||} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_1) k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_1, t_1) \quad (2.1.36)$$

décrit la contribution de l'ensemble des chemins optiques ne subissant aucune diffusion. Ces chemins optiques sont alors défini par leur position d'émission $\mathbf{r}_1 \in [\mathbf{r}_w, \mathbf{r}]$. Le terme

$$\begin{aligned} & \int_0^{||\mathbf{r} - \mathbf{r}_w||} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_1) k_{d\nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}) \left\{ L_\nu(\mathbf{r}_{w1}, \mathbf{u}_1, t_{w1}) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_{w1} \rightarrow \mathbf{r}_1) + \right. \\ & \left. \int_0^{||\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{w1}||} d\sigma_2(\mathbf{r}_2) \mathcal{T}_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2) k_{a\nu} L_\nu^0(\mathbf{r}_2, t_2) \right\} \end{aligned} \quad (2.1.37)$$

décrit la contribution de l'ensemble des chemins optiques subissant une seule diffusion. Ces chemins optiques sont définis par la position d'émission $\mathbf{r}_2 \in [\mathbf{r}_{w1}, \mathbf{r}_1]$, la direction d'émission \mathbf{u}_1 et la position de diffusion \mathbf{r}_1 .

Au cours de ce manuscrit, il nous arrivera fréquemment de présenter de telles écritures intégrales de l'ETR, c'est-à-dire en nous appuyant sur une décomposition en sous-ensembles définis par le nombre de diffusions ou de réflexions de l'espace des chemins optiques.

2.2 Méthode de Monte-Carlo (MMC)

Introduite par Metropolis[29], la méthode de Monte-Carlo est une méthode statistique de calcul numérique. Nous choisissons dans cette présentation de MMC de distinguer deux approches différentes :

- Une première approche que nous appellerons approche “analogue” consiste à considérer MMC comme une méthode de simulation numérique de phénomènes statistiques. En transferts radiatifs, cette approche se base sur les notions de physique statistique que nous avons introduites précédemment.

- La seconde approche, que nous appellerons approche “intégrale”, consiste à considérer MMC comme une méthode numérique de calcul intégral. Cette approche a donc comme préalable la proposition d'une formulation intégrale pour chaque grandeur physique étudiée. MMC peut être ainsi considérée en transferts radiatifs comme une méthode de résolution numérique de l'ETR sous forme intégrale. Nous choisissons de porter l'accent sur cette seconde approche de MMC car la méthodologie d'estimation simultanée de sensibilités que nous décrivons au chapitre suivant est basée sur les principes du calcul intégral par Monte-Carlo.

Avant d'aller plus loin, soulignons le fait que ces deux approches ne sont jamais exclusives. L'approche analogue est souvent mise en avant dans la littérature concernant la simulation numérique des transferts radiatifs par MMC [14, 30, 13, 31]. Il existe deux raisons principales à cela : la première est dûe au fait qu'une description analogue de MMC, se basant sur des images physiques de transport corpusculaire permet une compréhension intuitive de la méthode. La seconde raison est que certains avantages offerts par l'approche intégrale de MMC restent utilisables même en occultant les principes de bases du calcul intégral par MMC. Nous discutons de ce dernier point au cours du paragraphe 2.2.4 dans lequel nous présentons des méthodes d'optimisations de MMC. Si l'approche analogue est ainsi régulièrement suffisante pour décrire

les algorithmes de Monte-Carlo, nous verrons cependant que dans certaines applications, l'aspect intégral de MMC peut servir à surmonter des difficultés de convergence inhérentes aux MMC analogues.

En fin de chapitre, nous présenterons quelques techniques d'optimisations de la méthode et nous nous intéresserons plus spécifiquement à deux études effectuées au laboratoire d'Energétique et au Laboratoire de Génie des procédés des solides divisés. Cette thèse a été réalisée dans la continuité de ces travaux où l'aspect intégral de MMC a été mis en valeur comme ayant permis d'optimiser MMC dans des milieux optiquement épais et dans des milieux quasi-isothermes.

2.2.1 Présentation de MMC par une approche analogue

Nous avons vu précédemment que les équations de conservations en physique du transport correspondent à une description stochastique du mouvement des particules à l'échelle microscopique. Les méthodes de Monte-Carlo dites analogues consistent à reconstruire cette statistique par la simulation d'un grand nombre de trajectoires de particules dans le système considéré. La grandeur physique est alors calculée par la moyenne de l'observable microscopique correspondante. Par exemple, si on s'intéresse à la transmission d'un faisceau laser à travers une couche de gaz, la méthode de Monte-Carlo analogue consiste à simuler la trajectoire d'un grand nombre de photons à l'intérieur de la couche. La fraction d'énergie transmise à travers cette couche sera alors estimée par le calcul du pourcentage de photons transmis.

Générations pseudo-aléatoires d'une variable aléatoire

La simulation du trajet optique d'un photon est fonction des probabilités d'occurrence des divers événements pouvant intervenir dans le système (comme l'émission, l'absorption ou des diffusions de photons). Chaque événement est généré aléatoirement selon une densité de probabilité. Cette génération aléatoire s'effectue selon un processus numérique permettant de simuler une suite de nombres aléatoires distribués uniformément sur un intervalle donné (dans notre cas, nous nous intéressons à des générateurs aléatoires sur l'intervalle $[0, 1]$). Cette suite de nombres est dite pseudo-aléatoire puisque divers algorithmes mathématiques permettent de "simuler le hasard". Ces générations sont maîtrisées et ont une période donnée. Plus la période sera grande et plus le générateur pseudo-aléatoire sera intéressant⁷. A titre de référence, on peut citer le générateur RANLUX de la librairie informatique du CERN[32], même si pour les exemples auxquels nous allons nous intéresser, des générateurs moins évolués (tels que ceux de Numerical Recipes[33]) peuvent être satisfaisants.

A partir de nombres aléatoires $R_i \in [0, 1]$, on cherche ensuite à déduire une réalisation x_i d'une variable aléatoire X . Par exemple, si on cherche la position de diffusion d'un photon, cette réalisation correspondra à l'abscisse curviligne σ de cette position le long de la trajectoire directe. Pour obtenir une réalisation x_i d'une variable aléatoire X selon la densité de probabilité p_X définie sur $[a, b]$ à partir de nombres aléatoires $R_i \in [0, 1]$, il existe différentes méthodes. Lorsque cela est possible d'un point de vue analytique, on utilise la fonction de répartition ou fonction de distribution cumulée $g(x) = \int_a^x p_X(y)dy$. Celle-ci décrit la probabilité qu'une

⁷Il existe bien d'autres critères pour définir la qualité d'un générateur (par exemple sa capacité à couvrir uniformément l'intervalle sur des zones et non uniquement sur la période complète).

réalisation y de la variable aléatoire X ait une valeur inférieure à x . Cette fonction est croissante et définie sur $[0, 1]$, donc en posant $R_i = g(x_i)$, on obtient la réalisation x_i par l'inversion de la fonction de distribution cumulée :

$$x_i = g^{-1}(R_i) \quad (2.2.1)$$

Revenons à l'exemple du tirage aléatoire d'une position de diffusion. Nous avons vu précédemment que la probabilité pour que la distance parcourue par un photon entre deux diffusions soit σ suit la loi de Beer-Lambert. La densité de probabilité, définie sur \mathbb{R}^+ , est donc égale à $p_\Sigma(\sigma) = k_d e^{-\int_0^\sigma k_d(l)dl}$. Si on suppose le coefficient de diffusion constant le long du trajet optique, l'épaisseur optique peut s'écrire : $\int_0^\sigma k_d(l)dl = k_d\sigma$ et la fonction de répartition $g(\sigma)$ est alors égale à :

$$g(\sigma) = \int_0^\sigma k_d e^{-k_d l} dl = 1 - e^{-k_d \sigma} \quad (2.2.2)$$

Si R_σ est le nombre aléatoire générée dans l'intervalle $[0, 1]$, la position σ est alors déduite de :

$$\sigma = -\frac{\ln(1 - R_\sigma)}{k_d} \quad (2.2.3)$$

L'inversion de la fonction de distribution cumulée permet donc de déduire la réalisation d'une variable aléatoire monodimensionnelle. Il existe d'autres techniques de génération d'une réalisation d'une variable aléatoire, décrites notamment dans [34] et que nous ne présentons pas ici car cela sort du cadre de cette thèse.

Dans les cas où la fonction de distribution cumulée ne peut pas être inversée, nous préférons changer de densité de probabilité par la technique d'échantillonnage préférentiel que nous décrivons dans la suite de ce chapitre (voir le paragraphe 2.2.4)⁸.

Remarque Lorsque la variable aléatoire considérée n'est plus scalaire mais vectorielle, il est toujours possible de se ramener à la génération de plusieurs variables aléatoires monodimensionnelles. Par exemple le tirage aléatoire d'une direction (d'émission ou de diffusion) \mathbf{u} peut se ramener au tirage aléatoire de deux scalaires qui sont les deux angles, azimuthal φ et polaire θ , définissant cette direction. La probabilité $p_U(\mathbf{u})d\mathbf{u}$ est alors égale à :

$$p_U(\mathbf{u})d\mathbf{u} = p_\Theta(\theta)p_\varphi(\varphi/\theta)d\varphi d\theta \quad (2.2.4)$$

Dans la suite de ce chapitre, au cours de la présentation du principe du calcul intégral par MMC, nous verrons que le fait de pouvoir toujours se ramener au tirage aléatoire d'une réalisation de variables aléatoires monodimensionnelles va permettre de décomposer le domaine d'intégration D de la grandeur intégrale estimée par MMC en un produit de n sous-domaines monodimensionnels (si n est la dimension du domaine D) :

$$D = D_1 \times D_2 \times \cdots \times D_n \quad (2.2.5)$$

où $\forall i \in \{1, \dots, n\}$ D_i est monodimensionnel. Nous insistons sur ce point car nous allons nous servir de cette décomposition du domaine d'intégration dans le chapitre suivant au cours des développements nous permettant d'établir une méthodologie d'estimation de sensibilités à la déformation du domaine par MMC.

⁸Dans le chapitre 4, paragraphe 4.1, nous traiterons un exemple d'algorithme de Monte-Carlo analogue où nous avons été contraint de changer de densité de probabilité parce qu'il n'était pas possible d'inverser la fonction de répartition. Nous discutons de ce point particulier en annexe A

Exemple d’algorithme

Pour illustration, nous allons détailler un algorithme de Monte-Carlo déduit d’une approche analogue. Nous allons considérer dans cet exemple une couche monodimensionnelle absorbante et diffusante, dont une des faces est soumise à un rayonnement gris isotrope. Les coefficients d’absorption k_a et de diffusion k_d sont homogènes dans la couche. Nous allons présenter un algorithme analogue permettant d’estimer la fraction d’énergie transmise par la couche ou transmittance que nous notons T . Comme nous le disions précédemment, ce type d’algorithme consiste à simuler le trajet optique de N photons et à calculer le pourcentage de photons transmis. Nous allons décrire dans ce paragraphe comment simuler le trajet optique d’un photon.

Avec une approche analogue, un algorithme dit “direct”⁹ est basé sur le suivi d’un photon depuis son émission, au cours de ces diverses interactions avec le milieu de propagation (réflexion, diffusion etc.) et jusqu’à son absorption ou sa sortie du système.

Direction d’incidence La génération d’un trajet optique dans cet exemple débute avec le tirage aléatoire d’une direction d’incidence. Ce tirage dépend du coefficient d’émissivité directionnel. Dans le cas d’un rayonnement isotrope, la génération aléatoire d’une direction d’incidence $\mathbf{u}_0(\varphi_0, \theta_0)$ se fait selon la densité de probabilité déduite de la loi de Lambert :

$$p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) = \frac{\cos \theta_0}{\pi} \quad (2.2.6)$$

où $\theta_0 \in [0, \frac{\pi}{2}]$ est l’angle polaire et $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$ l’angle azimutal. D’après la relation

$$p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0)d\mathbf{u}_0 = \frac{\cos \theta_0}{\pi} \sin \theta_0 d\varphi_0 d\theta_0 = p_{\phi_0} d\varphi_0 p_{\Theta_0} d\theta_0 \quad (2.2.7)$$

on déduit le tirage aléatoire des deux angles φ_0 et θ_0 selon les deux densités de probabilité :

$$\begin{aligned} p_{\phi_0} &= \frac{1}{2\pi} \\ p_{\Theta_0}(\theta_0) &= 2 \sin \theta_0 \cos \theta_0 \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

Suivi d’un photon dans le milieu de propagation Une fois que la direction de propagation du photon est connue, il faut déterminer une position d’extinction \mathbf{r} suivant la loi d’atténuation exponentielle de Beer-Lambert décrite précédemment. Cette position définie par son abscisse curviligne noté σ le long du trajet optique est générée aléatoirement selon la densité de probabilité :

$$p_\Sigma(\sigma) = k e^{-\int_0^\sigma k(l) dl} \quad (2.2.9)$$

où k est le coefficient d’extinction égal à $k_a + k_d$. Dans cet exemple k est constant, on a donc $p_\Sigma(\sigma) = k e^{-k\sigma}$.

Si cette position d’extinction est hors de la couche, soit le photon est transmis soit il est réfléchi par la couche. Dans ce cas, on passe à la simulation du trajet optique d’un autre photon. Si la position d’extinction est dans la couche, il reste à savoir si cette extinction a lieu

⁹Nous appelons ces algorithmes “directs” dans le but de les différencier des algorithmes inverses dont nous discutons dans la suite de ce paragraphe

par absorption ou par diffusion. Pour cela, on sait que l'albédo de diffusion $\omega = \frac{k_d}{k_a+k_d}$ représente la probabilité pour que cette extinction ait lieu par diffusion. On génère alors aléatoirement un nombre $R \in [0, 1]$. Si $R > \omega$ alors l'extinction a lieu par absorption. Dans ce cas, le photon n'est pas transmis et on passe à la simulation du trajet optique d'un autre photon. Si $R < \omega$ alors l'extinction a lieu par diffusion et on passe au tirage aléatoire d'une direction de diffusion.

Le tirage aléatoire d'une direction de diffusion $\mathbf{u}(\theta, \varphi)$ se fait selon la densité de probabilité donnée par la fonction de phase. Si la diffusion est isotrope, on a :

$$p_{\mathbf{U}} d\mathbf{u} = \frac{d\mathbf{u}}{4\pi} = p_\Theta p_\phi d\varphi d\theta \quad (2.2.10)$$

dont on déduit $p_\Theta(\theta) = \frac{\sin\theta}{2}$ et $p_\phi = \frac{1}{2\pi}$. Une fois que \mathbf{u} est déterminé, on tire aléatoirement une nouvelle position d'extinction de la même manière que précédemment.

Cet algorithme est détaillé sur la figure 2.5.

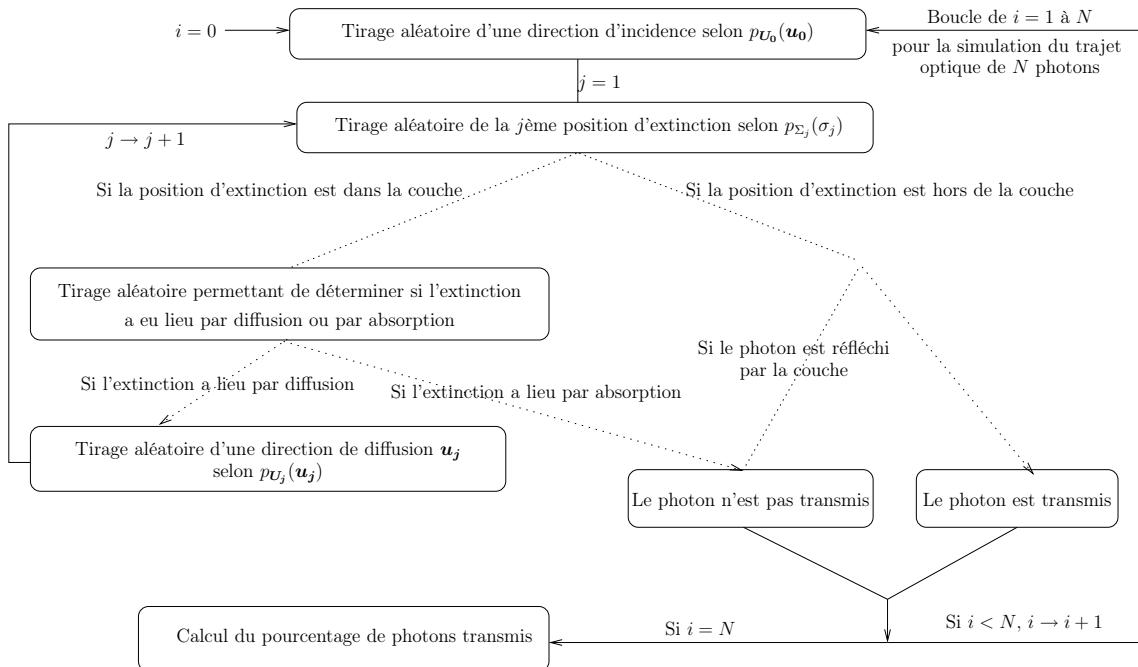


FIG. 2.5 – Exemple d'algorithme analogue utilisé pour le calcul de la transmittance à travers une couche monodimensionnelle, absorbante et diffusante d'un rayonnement gris et isotrope

Remarques sur le développement des algorithmes analogues

Nous avons choisi de présenter un algorithme basé sur le suivi d'un photon au cours de ses diverses interactions avec la matière. Il existe de nombreux et divers algorithmes analogues ne suivant pas le trajet du photon comme nous l'avons décrit. Par exemple, afin d'éviter que de nombreux photons soient trop vite absorbés (ce qui peut augmenter fortement l'incertitude statistique associée à la transmittance), il est possible de découpler dans l'algorithme les phénomènes de diffusion et d'absorption. Dans ces cas-là, l'image physique correspondante est le suivi d'un paquet de photons. On simule alors le trajet optique de N paquets de photons en ne considérant dans un premier temps que les phénomènes de diffusion. Ensuite, en fonction de ce trajet optique (de sa longueur et des propriétés optiques du milieu de propagation), l'absorption

est traitée séparément par la multiplication de la puissance initiale du paquet de photon par un terme tenant compte de l'atténuation exponentielle par absorption¹⁰. Dans l'exemple que nous venons de traiter, la grandeur calculée ne serait plus le pourcentage de photons transmis mais la valeur moyenne de la puissance radiative transmise par les N paquets de photons. Wong et al ont étudié les avantages et les inconvénients des différentes techniques de traitement de l'absorption dans [35]. Nous verrons par la suite que ce changement d'algorithme peut aussi s'interpréter à l'aide de l'approche intégrale.

Algorithme de Monte-Carlo inverse Basé sur le principe de réciprocité[36], un algorithme de Monte-Carlo inverse consiste à suivre les chemins optiques des photons dans leurs sens inverses, c'est-à-dire depuis le point final du trajet optique jusqu'à la source d'émission. Les MMC inverses sont bien adaptées aux systèmes avec une source radiative large et des détecteurs de petite taille puisqu'elles évitent de perdre du temps à générer des trajets optiques partant de la source mais n'atteignant pas le détecteur. Walters et Buckius[37], Ishimoto [38] et Modest [39] ont contribué aux développements des méthodes de Monte-Carlo inverse. Lu et Hsu[40] ont développé des algorithmes de Monte-Carlo inverse dans des problèmes instationnaires. Nous revenons sur cette dernière étude dans le chapitre 4, paragraphe 4.2.

Comme dit en introduction de ce paragraphe, cette approche analogue, basée sur le point de vue statistique du transport, est complétée par une seconde approche dite intégrale. Cette seconde approche va notamment permettre d'estimer l'incertitude statistique sur les résultats mais aussi d'optimiser, si nécessaire, des algorithmes de MMC.

Dans la suite de ce chapitre, après avoir présenté les principes du calcul intégral par MMC, nous effectuerons le lien entre l'approche analogue et l'approche intégrale. Nous montrerons ainsi comment à partir d'un algorithme analogue, il est possible d'expliciter sous forme intégrale la grandeur estimée et nous en déduirons qu'il est possible d'associer simplement à chaque algorithme une formulation intégrale, et réciproquement d'associer à chaque formulation intégrale un algorithme.

2.2.2 Méthodes de Monte-Carlo pour le calcul intégral (MMC intégrales)

Nous commençons par rappeler le théorème de la limite centrale, qui va permettre l'estimation de l'incertitude statistique associée au calcul numérique d'une intégrale par MMC.

Énoncé du théorème de la limite centrale Soient $\{X_1, X_2, \dots, X_N\}$ un ensemble de N variables aléatoires¹¹ indépendantes et parentes. Les espérances de chacune de ces variables aléatoires sont égales de même que les variances : $\forall i = 1, \dots, N \quad E(X_i) = m$ et $\sigma_{X_i}^2 = \sigma^2$. On pose $S_N = X_1 + \dots + X_N$. La loi de probabilité p_{S_N} de la variable aléatoire S_N converge vers

¹⁰Si on note γ le trajet optique parcouru par le paquet de photons, et l_γ la longueur de ce chemin optique, la puissance initiale P_i du paquet de photons émis est alors multiplié par $\exp(-\int_0^{l_\gamma} k_a dl)$ qui est égal à $\exp(-k_a l_\gamma)$ si le coefficient d'absorption est homogène (loi de Beer-Lambert).

¹¹Les notations usuelles en statistique consiste à écrire les variables aléatoires en majuscule. La réalisation d'une variable aléatoire X sera notée en minuscule x . Nous noterons la densité de probabilité d'une variable aléatoire X par un symbole p indiqué par le nom de la variable aléatoire : p_X . Son écart-type sera noté σ_X

la loi normale pour $N \rightarrow +\infty$:

$$p_{S_N}(s_N) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma^2}} \exp\left(\frac{-(s_N - Nm)^2}{2N\sigma^2}\right) \quad (2.2.11)$$

Commentaires Le principe d'une méthode de Monte-Carlo est d'estimer une intégrale I comme l'espérance d'une variable aléatoire W , soit $I = E(W)$. L'algorithme consiste alors à effectuer une réalisation $y_N = \frac{s_N}{N}$ avec $s_N = w_1 + \dots + w_N$ de la variable aléatoire Y_N à l'aide d'un grand nombre N de réalisations indépendantes w_1, w_2, \dots, w_N de W . Cette réalisation $y_N = \frac{w_1 + \dots + w_N}{N}$ va servir d'estimateur de I puisque l'on a, si N est assez grand, $y_N = \langle W \rangle_N \simeq E(W) = I$ (on note $\langle W \rangle_N$ la valeur moyenne de N réalisations indépendantes de la variable aléatoire W). Connaissant la distribution de la variable aléatoire Y_N (voir

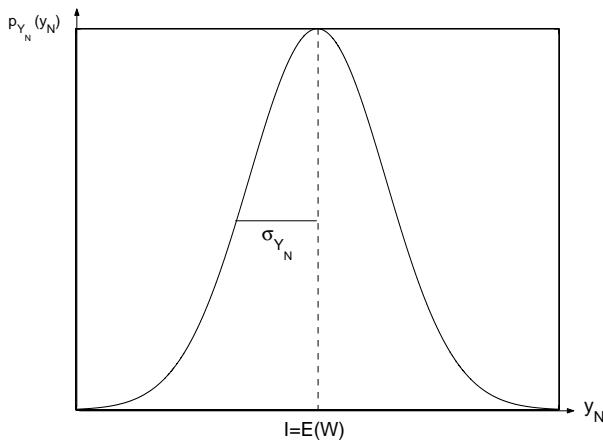


FIG. 2.6 – Tracé de la loi normale

la figure 2.6) grâce au théorème de la limite centrale, on peut également estimer l'erreur statistique correspondante à l'aide de l'écart-type $\sigma_{Y_N} = \frac{\sigma_W}{\sqrt{N}}$ de Y_N (σ_W est l'écart-type de W égal à $\sigma_W = \sqrt{E(W^2) - E(W)^2}$). L'erreur statistique sur l'estimation de I sera d'autant plus faible que σ_{Y_N} diminue et d'après la loi normale, la réalisation y_N a une probabilité égale à 0,683 de se trouver dans l'intervalle $[I - \sigma_{Y_N}; I + \sigma_{Y_N}]$, une probabilité égale à 0,954 de se trouver dans l'intervalle $[I - 2\sigma_{Y_N}; I + 2\sigma_{Y_N}]$ et une probabilité égale à 0,997 de se trouver dans l'intervalle $[I - 3\sigma_{Y_N}; I + 3\sigma_{Y_N}]$.

Principe du calcul intégral par MMC

Calcul d'une intégrale simple Soit une intégrale simple I ,

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (2.2.12)$$

L'introduction d'une densité de probabilité $p_X(x)$ définissant une variable aléatoire X permet de récrire I sous la forme :

$$I = \int_a^b p_X(x) \frac{f(x)}{p_X(x)} dx = \int_a^b p_X(x) w_I(x) dx \quad (2.2.13)$$

Dans la suite, nous appellerons $w_I(x) = \frac{f(x)}{p_X(x)}$ la fonction poids de Monte-Carlo associée au calcul de I . Si on définit la variable aléatoire $W_I = \frac{f(X)}{p_X(X)}$, l'intégrale I est égale à l'espérance de W_I :

$$I = E(W_I) = \langle W_I \rangle_{N \rightarrow +\infty} \quad (2.2.14)$$

On génère alors aléatoirement une série de réalisations $\{x_i\}_{i=1,N}$ de la variable aléatoire X dont on déduit une série de réalisations $\{w_{I,j} = w_I(x_j)\}_{j=1,N}$ de la variable aléatoire W_I . De cette série, on va déduire une réalisation y_N de la variable aléatoire $y_N = \frac{w_{I,1} + \dots + w_{I,N}}{N}$ et qui va nous servir à estimer l'espérance de W , et par conséquent d'estimateur de I .

$$I = E(W_I) \simeq y_N = \widehat{I} = \langle W_I \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{I,j} \quad (2.2.15)$$

Par application du théorème de la limite centrale, on en déduit que l'écart-type associé à cette estimation de I est égal à :

$$\sigma_{\widehat{I}} = \sigma_{y_N} = \frac{\sigma_{W_I}}{\sqrt{N}} = \frac{\sqrt{E(W_I^2) - E(W_I)^2}}{\sqrt{N}} \quad (2.2.16)$$

De la même manière que l'on a estimé I , on va avec la même série de réalisations indépendantes $\{w_{I,j} = w_I(x_j)\}_{j=1,N}$ de W_I estimer cet écart-type $\sigma_{\widehat{I}}$:

$$\sigma_{\widehat{I}} \simeq \frac{\sqrt{\langle W_I^2 \rangle_N - \langle W_I \rangle_N^2}}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{I,j}^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{I,j} \right)^2} \quad (2.2.17)$$

Calcul d'une intégrale multiple On considère maintenant une intégrale multiple de la forme :

$$I_n = \int_D f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.2.18)$$

où le domaine D est de dimension $n \in \mathbb{N}^+$ et $\mathbf{x} \in D$. Nous avons déjà précisé que dans les applications qui nous intéressent, la génération aléatoire d'une réalisation \mathbf{x} d'une variable aléatoire \mathbf{X} vectorielle de dimension n pouvait se ramener à n réalisations successives (x_1, x_2, \dots, x_n) de n variables aléatoires monodimensionnelles X_1, X_2, \dots, X_n . Chacune des variables aléatoires $X_i|_{\{i=1, \dots, n\}}$ est donc définie sur un sous-domaine monodimensionnel $D_i|_{\{i=1, \dots, n\}}$ tel que :

$$D = D_1 \times D_2 \times \dots \times D_n \quad (2.2.19)$$

La variable aléatoire X_i pouvant être dépendante des variables aléatoires X_1, \dots, X_{i-1} précédente, l'intégrale I_n peut donc s'écrire sous la forme :

$$I_n = \int_{D_1} dx_1 \int_{D_2} dx_2 \int_{D_3} dx_3 \dots \int_{D_n} dx_n f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.2.20)$$

Le principe établi pour une intégrale simple s'étend alors sans difficulté à une intégrale multiple. On note $p_{X_i}(x_i|x_1, \dots, x_{i-1})$ la densité de probabilité de la variable aléatoire X_i connaissant les

réalisations x_1, \dots, x_{i-1} des variables aléatoires X_1, \dots, X_{i-1} . Si on introduit n telles densités de probabilités, on peut réécrire I_n sous la forme :

$$I_n = \int_{D_1} p_{X_1}(x_1) dx_1 \int_{D_2} p_{X_2}(x_2/x_1) dx_2 \dots \int_{D_n} p_{X_n}(x_n/x_1, \dots, x_{n-1}) dx_n \frac{f(x_1, \dots, x_n)}{\prod_{i=1}^n p_{X_i}(x_i/x_1, \dots, x_{i-1})} \quad (2.2.21)$$

On pose alors la fonction poids de Monte-Carlo :

$$w_{I_n}(x_1, \dots, x_n) = \frac{f(x_1, \dots, x_n)}{\prod_{i=1}^n p_{X_i}(x_i/x_1, \dots, x_{i-1})} \quad (2.2.22)$$

et on introduit la variable aléatoire $W_{I_n} = \frac{f(X_1, \dots, X_n)}{\prod_{i=1}^n p_{X_i}(X_i/X_1, \dots, X_{i-1})}$. La grandeur I_n est alors égale à l'espérance de la variable aléatoire W_{I_n} :

$$I_n = E(W_{I_n}) = \langle W_{I_n} \rangle_{N \rightarrow +\infty} \quad (2.2.23)$$

On effectue donc une série de N réalisations de la variable aléatoire W_{I_n} : $\{w_{I_n,j}(x_{1j}, \dots, x_{nj})\}_{j=1,N}$ pour estimer I_n par la valeur moyenne $\langle W_{I_n} \rangle_N$:

$$I_n \simeq \widehat{I}_n = \langle W_{I_n} \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{I_n,j} \quad (2.2.24)$$

L'incertitude statistique associée à l'estimation de I_n est alors calculée par :

$$\sigma_{\widehat{I}_n} = \frac{\sigma_{W_{I_n}}}{\sqrt{N}} \simeq \frac{\sqrt{\langle W_{I_n}^2 \rangle_N - \langle W_{I_n} \rangle_N^2}}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{I_n,j}^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{I_n,j} \right)^2} \quad (2.2.25)$$

Remarque : Réécriture d'une intégrale à l'aide de l'introduction des densités de probabilités

Toutes les intégrales ne sont pas de la même forme que I_n . De nombreuses équations, telle que l'ETR, s'écrivent plutôt sous la forme suivante :

$$I = \int_{D_1} dx_1 \left\{ f_1(x_1) + g_1(x_1) \int_{D_2} dx_2 \left\{ f_2(x_1, x_2) + g_2(x_1, x_2) \int_{D_3} dx_3 \left\{ f_3(x_1, x_2, x_3) + \dots \right\} \right\} \right\} \quad (2.2.26)$$

où f_1, g_1, \dots sont des fonctions quelconques.

Si on introduit les densités de probabilité $p_{X_i}(x_i/x_1, \dots, x_{i-1})$ dans l'intégrale de l'équation 2.2.26, on obtient l'écriture suivante :

$$I = \int_{D_1} p_{X_1}(x_1) dx_1 \left\{ \frac{f_1(x_1)}{p_{X_1}(x_1)} + \frac{g_1(x_1)}{p_{X_1}(x_1)} \int_{D_2} p_{X_2}(x_2/x_1) dx_2 \left\{ \frac{f_2(x_1, x_2)}{p_{X_2}(x_2/x_1)} + \frac{g_2(x_1, x_2)}{p_{X_2}(x_2/x_1)} \int_{D_3} p_{X_3}(x_3/x_1, x_2) dx_3 \left\{ \frac{f_3(x_1, x_2, x_3)}{p_{X_3}(x_3/x_1, x_2)} + \dots \right\} \right\} \right\} \quad (2.2.27)$$

Il est ais  de r  ecrire cette int grale sous une forme ad quate au principe du calcul int gral par MMC. On se sert du fait que toutes les int grales sont pond r es par une densit  de probabilit . On r  crit I en regroupant l'ensemble des int grales pond r es en utilisant la relation simple suivante

$$f(x) = f(x) \int_D p_Y(y) dy = \int_D f(x)p_Y(y) dy \quad (2.2.28)$$

On applique ce type de relation   l' quation 2.2.27 et on obtient :

$$\begin{aligned} I &= \int_{D_1} p_{X_1}(x_1) dx_1 \int_{D_2} p_{X_2}(x_2/x_1) dx_2 \int_{D_3} p_{X_3}(x_3/x_1, x_2) dx_3 \dots \left\{ \frac{f_1(x_1)}{p_{X_1}(x_1)} + \frac{g_1(x_1)}{p_{X_1}(x_1)} \right. \\ &\quad \left. \left\{ \frac{f_2(x_1, x_2)}{p_{X_2}(x_2/x_1)} + \frac{g_2(x_1, x_2)}{p_{X_2}(x_2/x_1)} \left\{ \frac{f_3(x_1, x_2, x_3)}{p_{X_3}(x_3/x_1, x_2)} + \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.29)$$

On retrouve ainsi une  criture similaire   celle de l' quation 2.2.20, le poids w_I  tant donc :

$$w_I(x_1, x_2, \dots) = \frac{f_1(x_1)}{p_{X_1}(x_1)} + \frac{g_1(x_1)}{p_{X_1}(x_1)} \left\{ \frac{f_2(x_1, x_2)}{p_{X_2}(x_2/x_1)} + \frac{g_2(x_1, x_2)}{p_{X_2}(x_2/x_1)} \left\{ \frac{f_3(x_1, x_2, x_3)}{p_{X_3}(x_3/x_1, x_2)} + \dots \right\} \right\} \quad (2.2.30)$$

2.2.3 Liens entre l'approche analogue et l'approche int grale

Toutes les m thodes de Monte-Carlo auxquelles nous songeons calculent une int grale. Dans le cas des algorithmes analogues, nous avons vu que l'int grale estim e n'a pas besoin d' tre explicit e. Cependant, pour appliquer la m thodologie de calcul simultan e de sensibilit  par MMC pr sent e au chapitre suivant, l' criture int grale de la grandeur dont on souhaite estimer des sensibilit s est n cessaire. Ainsi si l'on souhaite appliquer cette m thodologie   un algorithme analogue, il faut au pr alable formuler la grandeur estim e par cet algorithme. Dans ce but, nous pr sentons une d marche m thodologique permettant de d duire   partir d'un algorithme analogue une formulation int grale correspondante.

D veloppement d'une formulation int grale   partir d'un algorithme

Dans la pr sentation qui suit, nous nous appuyons sur l'exemple d'algorithme analogue pr sent  au paragraphe 2.2.1 et d crit sur la figure 2.5. Cet algorithme permet le calcul de la fraction d' nergie transmise (la transmittance T) par une couche monodimensionnelle, absorbante, diffusante, et soumise   un rayonnement gris isotrope.

La d marche que nous proposons consiste   :

- Associer   chaque nouvelle g n ration al atoire une int grale avec des bornes d'int grations d duites du domaine dans lequel la densit  de probabilit  est d finie. Au fur et   mesure que les g n rations al atoires se succ dent, les int grales s'empilent alors les unes sur les autres.
- D crire chaque condition impos e par l'algorithme   l'aide de la fonction  chelon (ou heaviside) not e $H(x)$ et d finie par :

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

On suit ainsi l'algorithme point par point et on reconstruit la formulation intégrale de la grandeur estimée. Sur la figure 2.5, la première étape de l'algorithme consiste à générer aléatoirement une direction d'incidence selon $p_{U_0}(\mathbf{u}_0) = \frac{\cos \theta_0}{\pi}$. D'après le principe du calcul intégral par MMC, cela correspond à l'intégrale suivante (cf équation 2.2.10) :

$$T = \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \dots = \int_0^{2\pi} p_{\Phi_0}(\varphi_0) d\varphi_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_0}(\theta_0) d\theta_0 \dots \quad (2.2.31)$$

La seconde étape de l'algorithme consiste à générer aléatoirement une position d'extinction σ_1 selon $p_{\Sigma_1}(\sigma_1) = ke^{-k\sigma_1}$. On rappelle que $k = k_a + k_d$ est le coefficient d'extinction constant dans la couche et que σ_1 est l'abscisse curviligne de la première position d'extinction du photon. Cette génération correspond à une intégrale sur le sous-domaine monodimensionnel $\mathbb{R}^+ = [0, +\infty[$ qui représente l'ensemble des valeurs possible de σ_1 . On empile donc l'intégrale suivante sur l'expression de T :

$$T = \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \dots \quad (2.2.32)$$

Ensuite, l'algorithme dépend d'une condition : soit la position d'extinction est à l'intérieur de la couche, soit la position d'extinction est à l'extérieur de la couche. Pour décrire cette condition, on introduit la distance $d_0 = \frac{e}{\cos \theta_0}$ qui est la distance maximale que doit parcourir le photon avant de sortir de la couche. Si $\sigma_1 > d_0$, ce qui se traduit formellement par $H(\sigma_1 - d_0) = 1$ le photon est transmis par la couche sans subir d'extinction. Si $\sigma_1 < d_0$ ce qui équivaut à $H(d_0 - \sigma_1) = 1$, alors on continue de simuler le trajet optique du photon. On traduit donc cette condition dans l'expression de T par :

$$T = \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \dots \right\} \quad (2.2.33)$$

Si $H(d_0 - \sigma_1) = 1$, le photon subit une extinction à l'intérieur de la couche. D'après l'algorithme, on génère alors aléatoirement un nombre r_1 uniformément sur $[0, 1]$. Cette génération aléatoire se traduit par l'empilement d'une nouvelle intégrale selon :

$$T = \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \int_0^1 dr_1 \dots \right\} \quad (2.2.34)$$

De r_1 on déduit en fonction de l'albédo de diffusion $\omega = \frac{k_d}{k_a + k_d}$ le fait que l'extinction a lieu par absorption ou diffusion : Si $(r_1 > \omega) \equiv (H(r_1 - \omega) = 1)$, l'extinction a lieu par absorption, le photon n'est pas transmis. On multiplie alors par 0 puisque ce photon ne fait pas partie du pourcentage de photon transmis. Si $(r_1 < \omega) \equiv (H(\omega - r_1) = 1)$, l'extinction a lieu par diffusion, on continue alors la simulation du trajet optique. Formellement cela se traduit par :

$$\begin{aligned} T &= \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \right. \\ &\quad \left. \int_0^1 dr_1 \left\{ H(r_1 - \omega) \times 0 + H(\omega - r_1) \dots \right\} \right\} \\ &= \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \right. \\ &\quad \left. \int_0^1 dr_1 \left\{ H(\omega - r_1) \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

Si $H(\omega - r_1) = 1$, on génère aléatoirement une direction de diffusion selon la fonction de phase : $p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) = \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1)$ puis on génère aléatoirement une nouvelle position d'extinction σ_2 selon $p_{\Sigma_2}(\sigma_2) = ke^{-k\sigma_2}$ où $k = k_a + k_d$. Cela se traduit formellement par :

$$\begin{aligned} T &= \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \int_0^1 dr_1 \right\} \\ &\quad H(\omega - r_1) \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \dots \} \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

Comme précédemment, soit σ_2 est dans la couche, soit σ_2 est à l'extérieur de la couche. On

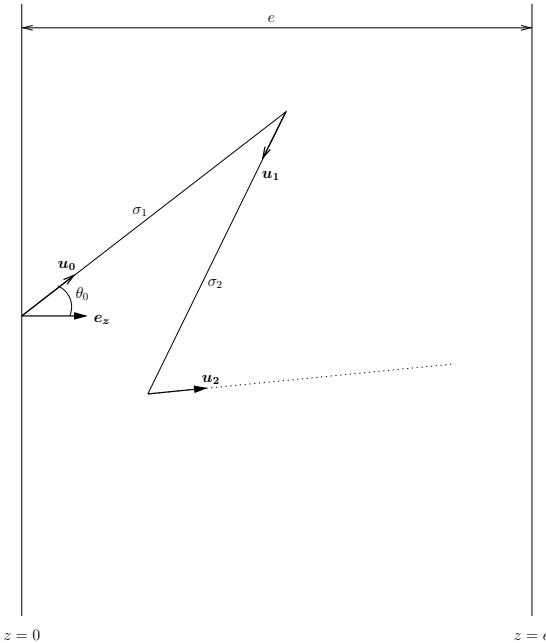


FIG. 2.7 – Description des notations utilisées lors de la formulation de la transmittance donnée par 2.2.37 .

introduit alors d_1 tel que si $(\sigma_2 > d_1) \equiv (H(\sigma_2 - d_1) = 1)$, la seconde position d'extinction est à l'extérieur de la couche. Dans ce cas-là, soit le photon est transmis, soit il est réfléchi ; cela dépend de la direction de propagation du photon \mathbf{u}_1 . Si \mathbf{u}_1 est dirigé vers la face de la couche soumise au rayonnement incident (face d'équation $z = 0$ sur la figure 2.7), le produit scalaire $\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z$ est négatif et le photon sera réfléchi¹². Si $(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z > 0) \equiv (H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) = 1)$ le photon sera transmis. Si maintenant $(\sigma_2 < d_1) \equiv (H(d_1 - \sigma_2) = 1)$, alors la simulation du trajet optique du photon se poursuit. On obtient alors l'expression suivante de T :

$$\begin{aligned} T &= \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \int_0^1 dr_1 \right\} H(r_1 - \omega) \times 0 + \\ &\quad H(\omega - r_1) \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \\ &\quad \left\{ H(\sigma_2 - d_1) \left\{ H(-\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \times 0 + H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \right\} + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.37)$$

¹²Par réfléchi, nous entendons que le photon est rétrodiffusé par la couche et ressort de celle-ci par la même face que celle par laquelle ce photon est entré dans la couche

T se réécrit alors :

$$\begin{aligned} T &= \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \int_0^1 dr_1 \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \dots \\ &\quad w(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) \end{aligned} \quad (2.2.38)$$

où $w(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots)$ est la fonction poids de Monte-Carlo qui s'écrit :

$$\begin{aligned} w(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) &= H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1)H(\omega - r_1) \left\{ \right. \\ &\quad H(\sigma_2 - d_1)H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) + H(d_1 - \sigma_2) \dots \left. \right\} \\ &\quad (2.2.39) \end{aligned}$$

w est égal à 1 si le photon est transmis et égal à 0 s'il ne l'est pas.

“Association” d'un algorithme et d'une formulation intégrale

L'expression 2.2.37 de la transmittance T est une formulation intégrale déduite de l'algorithme donné sur la figure 2.5. Cette démarche envisagée de manière réciproque nous conduit simplement d'une formulation intégrale à un algorithme.

A titre d'exemple rappelons l'expression de l'ETR intégrale (voir le paragraphe 2.1.4) :

$$\begin{aligned} L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) &= L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t_w) T_\nu(\mathbf{r}_w \rightarrow \mathbf{r}) + \int_0^{||\mathbf{r}-\mathbf{r}_w||} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) T_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}) \left\{ k_{av} L_\nu^0(\mathbf{r}_1, t_1) \right. \\ &\quad + k_{d\nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}) \left\{ L_\nu(\mathbf{r}_{w1}, \mathbf{u}_1, t_{w1}) T_\nu(\mathbf{r}_{w1} \rightarrow \mathbf{r}_1) + \right. \\ &\quad \left. \int_0^{||\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_{w1}||} d\sigma_2(\mathbf{r}_2) T_\nu(\mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1) \left\{ k_{av} L_\nu^0(\mathbf{r}_2, t_2) + k_{d\nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}_2 \phi_\nu(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_2 \rightarrow \mathbf{u}_1) \left\{ \right. \right. \right. \\ &\quad L_\nu(\mathbf{r}_{w2}, \mathbf{u}_2, t_{w2}) T_\nu(\mathbf{r}_{w2} \rightarrow \mathbf{r}_2) + \int_0^{||\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_{w2}||} d\sigma_3(\mathbf{r}_3) T_\nu(\mathbf{r}_3 \rightarrow \mathbf{r}_2) \left\{ k_{av} L_\nu^0(\mathbf{r}_3, t_3) \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.40)$$

Cette intégrale se réécrit en introduisant les densités de probabilités sous la forme

$$\begin{aligned} L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) &= \int_0^{||\mathbf{r}-\mathbf{r}_w||} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1(\mathbf{r}_1) \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1 | \sigma_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{||\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_{w1}||} p_{\Sigma_2}(\sigma_2 | \mathbf{u}_1, \sigma_1) d\sigma_2(\mathbf{r}_2) \\ &\quad \int_{4\pi} p_{U_2}(\mathbf{u}_2 | \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2) d\mathbf{u}_2 \dots w(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \mathbf{u}_2, \dots) \end{aligned} \quad (2.2.41)$$

où la fonction w est égale à :

$$\begin{aligned} w(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \mathbf{u}_2, \dots) &= L_\nu(\mathbf{r}_w, \mathbf{u}, t_w) T_\nu(\mathbf{r}_w \rightarrow \mathbf{r}) + \frac{T_\nu(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r})}{p_{\Sigma_1}(\sigma_1)} \left\{ k_{av} L_\nu^0(\mathbf{r}_1, t_1) \right. \\ &\quad + k_{d\nu} \frac{\phi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u})}{p_{U_1}(\mathbf{u}_1 | \sigma_1)} \left\{ L_\nu(\mathbf{r}_{w1}, \mathbf{u}_1, t_{w1}) T_\nu(\mathbf{r}_{w1} \rightarrow \mathbf{r}_1) + \right. \\ &\quad \left. \frac{T_\nu(\mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1)}{p_{\Sigma_2}(\sigma_2 | \mathbf{u}_1, \sigma_1)} \left\{ k_{av} L_\nu^0(\mathbf{r}_2, t_2) + k_{d\nu} \frac{\phi_\nu(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_2 \rightarrow \mathbf{u}_1)}{p_{U_2}(\mathbf{u}_2 | \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left\{ L_\nu(\mathbf{r}_{w2}, \mathbf{u}_2, t_{w2}) T_\nu(\mathbf{r}_{w2} \rightarrow \mathbf{r}_2) + \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.42)$$

De cette écriture intégrale, on déduit un algorithme consistant à :

- Générer aléatoirement une position de diffusion \mathbf{r}_1 sur le segment défini par les points \mathbf{r}_w et \mathbf{r} (voir la figure 2.4 où ces notations sont représentées sur un exemple de chemin optique).
- Générer aléatoirement une direction de diffusion \mathbf{u}_1 sur l'espace des angles solides 4π .
- Générer aléatoirement une nouvelle position de diffusion \mathbf{r}_2 sur le segment défini par les points \mathbf{r}_{w1} et \mathbf{r}_1 puis une nouvelle direction de diffusion \mathbf{u}_2 et ainsi de suite.

L'algorithme ainsi déduit de l'ETR consiste à générer aléatoirement un trajet optique γ dans son sens inverse, en partant du point d'arrivée \mathbf{r} , dans la direction $-\mathbf{u}$. Ce trajet est défini par les positions et directions successives tirées aléatoirement : $(\mathbf{r}_1, -\mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2, -\mathbf{u}_2, \dots)$. \mathbf{r}_1 est alors la dernière diffusion du trajet γ , \mathbf{r}_2 est son avant-dernière diffusion et ainsi de suite. A la fin de la génération aléatoire du trajet γ , que l'on définit par un critère géométrique, physique ou mathématique (nous discutons de ce point particulier dans la suite de ce paragraphe), on calcule alors la fonction poids w et on recommence la génération aléatoire d'un nouveau trajet optique.

Remarque sur la dimension infinie du domaine d'intégration De façon générale en théorie du transport, lorsque des phénomènes de diffusions ou de réflexions multiples sont pris en compte, les intégrales (expression 2.2.37 par exemple) ont des domaines d'intégration de dimension infinie. L'algorithme que nous venons de présenter, basé sur l'ETR, est incomplet puisque nous n'avons pas introduit de critère permettant d'arrêter la génération aléatoire du trajet optique.

Ceci n'est pas une difficulté lorsque les algorithmes de Monte-Carlo sont développés à l'aide d'une approche analogue puisque les conditions d'arrêts de la simulation du trajet optique sont automatiques. Ces conditions sont alors basées sur des critères physiques ou géométriques. Par exemple, dans l'algorithme analogue de la figure 2.5, il existe plusieurs conditions d'arrêt. La première est physique : l'algorithme arrête de simuler le trajet optique du photon si celui-ci est absorbé. La seconde est géométrique : l'algorithme arrête de simuler le trajet optique du photon si celui-ci sort de la couche. D'un point de vue formel, ces conditions d'arrêts se traduisent par l'introduction de fonctions échelons dans l'intégrale. Au cours de ce manuscrit¹³, il nous arrivera de développer des algorithmes à partir d'une intégrale de dimension infinie. Dans ces cas-là, nous serons inversement contraints de travailler au préalable sur la formulation intégrale de la grandeur à l'aide des fonctions échelons pour introduire une condition d'arrêt de la simulation.

2.2.4 Quelques techniques d'optimisations de la méthode de Monte-Carlo

Nous présentons maintenant des techniques d'optimisations des méthodes de Monte-Carlo qui sont fréquemment employées dans le cadre du calcul des transferts radiatifs et dont nous serons amené à rediscuter au cours de ce manuscrit. Nous renvoyons le lecteur aux ouvrages de référence sur la méthode tels que [34] ou [41] pour une présentation plus complète.

Par optimisation, nous entendons une diminution des temps de calcul des codes basés sur MMC, de manière indirecte, par une diminution des variances associées aux estimations : pour une incertitude statistique fixée, on peut ainsi diminuer le nombre N d'échantillons nécessaires.

¹³Dans le chapitre 4, paragraphe 4.3 et 4.4

Échantillonage préférentiel

Considérons à nouveau l'intégrale suivante introduite dans le paragraphe 2.2.2 :

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (2.2.43)$$

que l'on estime à l'aide d'un algorithme de Monte-Carlo dans lequel on a introduit une densité de probabilité $p_X(x)$ définie sur D . L'expression de l'écart-type de l'estimation obtenue par cet algorithme est donnée par l'équation 2.2.17 que nous rappelons :

$$\sigma_{\hat{I}} \simeq \frac{\sqrt{\langle W_I^2 \rangle_N - \langle W_I \rangle_N^2}}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{I,i}^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{I,i} \right)^2}$$

L'écart-type est dépendant du choix de la densité de probabilité à travers la distribution de la variable aléatoire $W_I = \frac{f(X)}{p_X(X)}$. L'échantillonnage préférentiel consiste à choisir astucieusement la densité de probabilité¹⁴ $p_X(x)$ pour diminuer l'écart-type[34, 42]. La variable aléatoire W a alors une distribution différente et un écart-type différent mais son espérance reste inchangée : les lois de tirage aléatoire sont modifiées mais l'algorithme converge toujours vers I exactement (pour un nombre infini de tirages).

Application de l'échantillonnage préférentiel à partir d'un algorithme analogue
L'échantillonnage préférentiel est une technique d'optimisation déduite de l'approche intégrale de MMC. Cependant, cette technique s'applique aisément aux algorithmes de Monte-Carlo analogues sans qu'il soit nécessaire d'expliciter complètement l'intégrale. Par exemple, dans un algorithme analogue quelconque, supposons que l'on souhaite remplacer une densité de probabilité $p_Y(y)$ utilisée pour générer aléatoirement une variable y par la densité de probabilité $p_{2Y}(y)$. Ce changement implique de multiplier la puissance radiative du photon (ou du paquet de photons) par $\frac{p_{2Y}(y)}{p_{Y}(y)}$ à chaque nouvelle génération aléatoire de y , .

Choix d'une densité de probabilité Dans une logique d'échantillonnage par importance, il est facile de voir que si la fonction f ne change pas de signe sur l'intervalle, la densité de probabilité

$$p_X(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x)dx} = \frac{f(x)}{I} \quad (2.2.44)$$

conduit à une variance nulle, c'est-à-dire à une estimation exacte de I quelque soit le nombre de tirages. Ceci signifie simplement que si on connaît la solution analytique de l'intégrale, on peut définir une densité de probabilité idéale telle que chaque génération se traduit par une valeur du poids qui est exactement la solution. Si l'intégrale est connue, l'utilisation de la méthode de Monte-Carlo est particulièrement inutile, mais on retiendra tout de même que plus l'expression de la densité de probabilité se rapproche de l'expression 2.2.44, plus l'erreur diminue. Ainsi, pour optimiser la méthode de Monte-Carlo, une possibilité est d'adapter une densité de probabilité en fonction de solutions analytiques obtenues dans des cas limites (par exemple en transfert

¹⁴Ce raisonnement s'étend sans difficulté au cas des intégrales multiples

radiatif des solutions à la limite optiquement épaisse et à la limite optiquement mince), puis d'étendre cette densité de probabilité par une somme pondérée à des cas plus généraux. A. de Lataillade a par exemple suivi cette logique pour optimiser une densité de probabilité pour le tirage aléatoire d'une direction d'émission afin d'adapter un algorithme de Monte-Carlo à des milieux d'épaisseurs optiques variées[7]¹⁵.

Optimisations par reformulation intégrale

Nous avons vu précédemment qu'à chaque algorithme de MMC, on pouvait associer une formulation intégrale. Un changement d'écriture par des exercices de reformulation peut donc changer l'algorithme et par conséquent faire varier les incertitudes statistiques associées aux estimations. Nous allons illustrer cette affirmation en reprenant l'exemple de l'algorithme analogue présenté dans la figure 2.5.

Nous avions obtenu dans le paragraphe 2.2.3 l'expression suivante de la fraction d'énergie transmise par une couche monodimensionnelle absorbante, diffusante, et soumise à un rayonnement gris isotrope sur une de ses faces :

$$\begin{aligned} T = & \int_{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \int_0^1 dr_1 \left\{ H(r_1 - \omega) \times 0 + \right. \right. \\ & H(\omega - r_1) \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \\ & \left. \left. \left\{ H(\sigma_2 - d_1) \left\{ H(-\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \times 0 + H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \right\} + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.45)$$

On remarque d'ores et déjà que $\forall i \in \mathbb{N}^+$, $\int_0^1 dr_i \left\{ H(r_i - \omega) \times 0 + H(\omega - r_i) \right\} = \omega$, on en déduit alors l'écriture suivante de T :

$$\begin{aligned} T = & \int_0^{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \omega \right. \\ & \times \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \left\{ H(\sigma_2 - d_1) \left\{ H(-\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \times 0 + \right. \right. \\ & \left. \left. H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \right\} + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \right\} \\ = & \int_0^{2\pi} p_{U_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \dots \\ & w_2(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) \end{aligned} \quad (2.2.46)$$

où $w_2(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots)$ est la fonction poids du nouvel algorithme de Monte-Carlo déduit de cette reformulation :

$$\begin{aligned} w_2(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) = & H(\sigma_1 - d_0) + H(d_0 - \sigma_1) \omega \left\{ H(\sigma_2 - d_1) \right. \\ & \left. \left\{ H(-\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \times 0 + H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) \right\} + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \end{aligned} \quad (2.2.47)$$

¹⁵Nous rediscutons ultérieurement dans ce chapitre de l'étude présentée dans [7]

Cet algorithme diffère du précédent par le fait que l'on n'effectue plus de test pour savoir si l'extinction a eu lieu par absorption ou diffusion. L'image physique correspondante est basée sur le transport d'un paquet de photons. A chaque nouvelle extinction, on considère qu'il y a absorption et diffusion et l'on ne tient compte que de la puissance radiative du paquet de photons qui est diffusée en multipliant le poids par l'albédo. On remarque de façon anecdotique que le passage du premier algorithme au second supprime un tirage aléatoire à chaque nouvelle extinction ce qui se traduit par un gain direct en temps de calcul

Remarque Au cours de la présentation des algorithmes analogues, nous avons discuté des algorithmes où les phénomènes de diffusion et d'absorption étaient découplés. Dans le cas du calcul de la grandeur T , la formulation intégrale associée à cet algorithme est équivalente à l'expression 2.2.46 ; la seule différence se trouve être le choix des densités de probabilités $p_{\Sigma_i}(\sigma_i)$ qui sont maintenant égales à $k_d e^{-k_d \sigma_i}$ (au lieu de $(k_a + k_d) e^{-(k_a + k_d) \sigma_i}$). L'expression de la fonction poids est alors :

$$w_3(\mathbf{u}_0, \sigma_1, r_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) = H(\sigma_1 - d_0) e^{-k_a d_0} + H(d_0 - \sigma_1) e^{-k_a (\sigma_1 + d_1)} \left\{ H(\sigma_2 - d_1) H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \quad (2.2.48)$$

Nous sommes passés de la fonction poids 2.2.47 à la fonction 2.2.48 par la technique d'échantillonnage préférentiel. Lors de cet algorithme, le trajet optique est simulé en ne tenant compte que des phénomènes de diffusion et l'absorption est traitée de manière intégrée en multipliant le poids par un terme d'atténuation exponentielle.

D'autres types de travaux sur la formulation peuvent changer un algorithme. Nous traiterons notamment un cas dans le chapitre suivant (voir le paragraphe 3.1.3) où un changement d'algorithme est basé sur une reformulation intégrale par changement de variable.

2.2.5 Exemples d'optimisation en transferts radiatifs

Cette thèse s'inscrit dans la continuité des études sur la méthode de Monte-Carlo dans le cadre des transferts radiatifs effectuées au laboratoire d'énergétique (LE) et au laboratoire de génie des procédés des solides divisés (LGPSC) et dont nous présentons brièvement deux exemples dans cette fin de chapitre.

Le premier exemple concerne une optimisation de MMC basée sur le choix d'une formulation intégrale ; le second concerne une optimisation basée sur les deux techniques de reformulations intégrales et d'échantillonnage préférentiel.

MMC basée sur une formulation en puissances nettes échangées

La formulation en puissances nettes échangées (PNE) est basée sur le principe de réciprocité. Introduite par Green[43] en science atmosphérique et Hottel et Sarofim[44] en science pour l'ingénieur, cette formulation a été appliquée et développée dans le cadre de MMC dans de nombreux travaux au LE et au LGPSD[4, 5, 6, 45, 2, 8] mais aussi par Tessé et al[46, 47, 48]. Ce choix de formulation permet d'exprimer simplement le bilan radiatif des éléments du découpage

géométrique d'un système. Par exemple :

$$S_R(V_i) = \sum_{j=1}^{N_V} \psi(V_i, V_j) + \sum_{j=1}^{N_S} \psi(V_i, S_j) \quad (2.2.49)$$

où $\psi(V_i, V_j)$ est la puissance nette échangée entre les éléments volumiques V_i et V_j et $\psi(V_i, S_j)$ est la puissance nette échangée entre V_i et l'élément surfacique S_j . N_V est le nombre de mailles volumiques dans le système et N_S le nombre de mailles surfaciques. La puissance nette échangée entre deux éléments de volume V_i et V_j s'écrit :

$$\psi(V_i, V_j) = \int_{V_i} d\mathbf{r}_i \int_{V_j} d\mathbf{r}_j \int_{\Gamma(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j)} d\gamma k_{av}(\mathbf{r}_i) e^{-\tau_\gamma} k_{av}(\mathbf{r}_j) [L_\nu(\mathbf{r}_j(\gamma)) - L_\nu(\mathbf{r}_i(\gamma))] \quad (2.2.50)$$

où $\Gamma(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j)$ représente l'ensemble des chemins optiques émis en \mathbf{r}_i et transmis jusqu'au

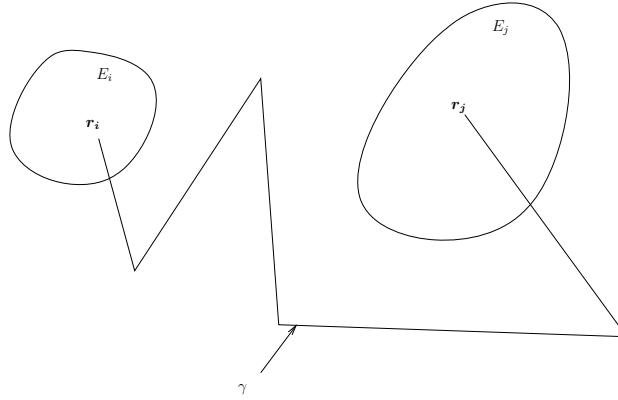


FIG. 2.8 – Description des notations utilisées lors de l'expression 2.2.50

point \mathbf{r}_j . τ_γ est l'épaisseur optique du trajet optique $\gamma \in \Gamma(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j)$.

$$\tau_\gamma = \int_0^{l_\gamma} k_{av} dl \quad (2.2.51)$$

où l_γ est la longueur totale de γ (voir la figure 2.8).

Exemple d'algorithme Pour utiliser un algorithme de Monte-Carlo basé sur une formulation en puissance nette échangée, il faut donc d'après l'expression 2.2.50 tirer aléatoirement deux positions, une position d'émission \mathbf{r}_i du chemin optique et une position d'absorption \mathbf{r}_j . L'approche utilisée par V. Eymet[3, 8] consiste à simuler le trajet optique γ d'un paquet de photons à partir d'un point \mathbf{r}_i . A chaque nouvelle maille V_j traversée par ce chemin optique, l'algorithme consiste à générer aléatoirement une position d'absorption dans cette maille V_j et à incrémenter le calcul de $\psi(V_i, V_j)$. Ainsi, au cours de la génération aléatoire de N trajets optiques γ , si N_j est le nombre de mailles dans le système, cet algorithme va calculer simultanément N_j puissances nettes échangées $\forall j = \{1, \dots, N_j\}$. La formulation en PNE a avant tout permis d'améliorer la convergence de MMC dans des milieux quasi-isothermes : si on considère l'échange entre deux mailles de gaz V_i et V_j , un algorithme analogue conduirait à estimer d'abord la puissance émise par V_i et absorbée par V_j (par le suivi statistique de photons émis

par V_i), puis la puissance émise par V_j et absorbée par V_i (par le suivi statistique de photons émis par V_j). Ces deux puissances auront des valeurs très proches en milieux quasi-isothermes. La différence

$$\psi(V_i, V_j) = \psi(V_j \rightarrow V_i) - \psi(V_i \rightarrow V_j) \quad (2.2.52)$$

aura alors une incertitude d'autant plus élevée que la différence de température entre V_i et V_j est faible. Avec une formulation en puissance nette échangée, on calcule directement $\psi(V_i, V_j)$ et la convergence des calculs est alors indépendante de l'écart de température.¹⁶

Second exemple : Optimisations de MMC pour le calcul des transferts radiatifs dans des milieux optiquement épais

A de Lataillade et al[1, 7] ont montré comment surmonter les difficultés inhérentes aux algorithmes de Monte-Carlo analogues dans des milieux optiquement épais par une reformulation intégrale et un choix adéquat de densités de probabilité. Ces difficultés de convergence sont liées au fait que dans des milieux épais, la plupart des rayons émis par une maille volumique sont rapidement absorbés à l'intérieur de la maille émettrice elle-même. De nombreux rayons deviennent alors inutiles dans le calcul des échanges radiatifs avec d'autres éléments du système, ce qui augmente fortement l'incertitude statistique.

Prenons l'exemple du calcul de la puissance P_e émise par un volume V non isotherme et atteignant sa frontière Σ . On supposera que le milieu au sein de V est non diffusant et que le coefficient d'absorption k_a est uniforme. Un algorithme analogue correspondrait à une formulation telle que

$$P_e = \int_V p_V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \int_{4\pi} p_U(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \frac{k_a L^0(T(\mathbf{r})) \exp(-k_a l(\mathbf{r}, \mathbf{u}))}{p_V(\mathbf{r}) p_U(\mathbf{u})} \quad (2.2.53)$$

où $l(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ est la longueur du trajet optique direct de la position \mathbf{r} jusqu'à la traversée de la frontière dans la direction \mathbf{u} (voir figure 2.9). Le poids w est donc

$$w(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = \frac{k_a L^0(T(\mathbf{r})) \exp(-k_a l(\mathbf{r}, \mathbf{u}))}{p_V(\mathbf{r}) p_U(\mathbf{u})} \quad (2.2.54)$$

où l'on voit clairement la source de variance qui est l'exponentielle représentant l'atténuation par absorption. A la limite optiquement épaisse, le poids tend vers zéro sauf pour les positions \mathbf{r} très proches de la frontière associées à des directions \mathbf{u} orientées vers la frontière. Pour contourner cette difficulté, A. de Lataillade et al ont proposé une formulation intégrale différente dans laquelle la frontière du domaine est mise au premier plan et où la distance $l(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ depuis la position d'émission jusqu'à la frontière devient une variable d'intégration.

$$P_e = \int_{\Sigma} p_{\Sigma}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} \int_{2\pi} p_U(\mathbf{u}/\mathbf{s}) d\mathbf{u} \int_0^{\mathcal{L}(\mathbf{s}, \mathbf{u})} p_L(l/\mathbf{s}, \mathbf{u}) dl \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) L^0(T(\mathbf{r})) k_a \exp(-k_a l)}{p_{\Sigma}(\mathbf{s}) p_U(\mathbf{u}/\mathbf{s}) p_L(l/\mathbf{s}, \mathbf{u})} \quad (2.2.55)$$

¹⁶Eymet et al[49] ont par ailleurs montré l'utilité d'une telle formulation dans le but de paramétriser les transferts radiatifs pour un modèle de couplage du rayonnement avec d'autres modes de transfert. La connaissance de la matrice des PNE entre éléments d'un système permet de déterminer quels échanges pilotent prioritairement les transferts radiatifs et par conséquent quels échanges peuvent être négligés lors d'une paramétrisation de ces transferts.

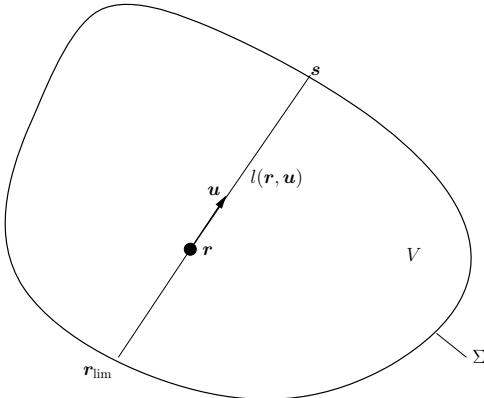


FIG. 2.9 – $l(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ est la distance entre un point \mathbf{r} dans le volume V et un point \mathbf{s} sur la frontière Σ .

Dans cette expression, la position \mathbf{r} se déduit simplement d'une position \mathbf{s} sur la frontière, d'une direction de sortie \mathbf{u} et d'une longueur l correspondant à la distance parcourue avant la sortie du volume. Évidemment, sous cette forme, on voit que lorsqu'on se place à la limite optiquement épaisse, l'échantillonnage préférentiel doit favoriser les faibles valeurs de l . Ceci est obtenu en retenant la densité de probabilité

$$p_L(l/\mathbf{s}, \mathbf{u}) = \frac{k_a \exp(-k_a l)}{1 - \exp(-k_a \mathcal{L}(\mathbf{s}, \mathbf{u}))} \quad (2.2.56)$$

Avec ce choix, le poids prend la forme suivante où le terme d'atténuation exponentielle a disparu :

$$w = \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) L^0(T(\mathbf{r})) \left[1 - \exp(-k_a \mathcal{L}(\mathbf{s}, \mathbf{u})) \right]}{p_\Sigma(\mathbf{s}) p_U(\mathbf{u}/\mathbf{s})} \quad (2.2.57)$$

et à la limite optiquement épaisse

$$w \simeq \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) L^0(T(\mathbf{r}))}{p_\Sigma(\mathbf{s}) p_U(\mathbf{u}/\mathbf{s})} \quad (2.2.58)$$

ce qui ne pose pas de difficulté de convergence spécifique. Cette idée a été appliquée pour l'adaptation automatique des lois de tirage en fonction de l'épaisseur optique lors de la gestion de spectres de raies de gaz moléculaires[7]. Elle a été ensuite étendue avec succès par V. Eymet aux fortes épaisseurs optiques de diffusion [8]. Cet exemple d'optimisation est représentatif de la complémentarité entre l'approche analogue et l'approche intégrale de MMC : à partir du point de vue analogue, A de Lataillade et al ont identifié la source des difficultés de convergence et en ont déduit qu'il fallait orienter les tirages aléatoires en bord de maille. La formulation intégrale a ensuite permis de développer un algorithme général pour répondre à cet objectif.

Chapitre 3

Calcul de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo

L'estimation des sensibilités des variables d'un modèle aux paramètres constitutifs est un acte courant dans de nombreux contextes scientifiques [50]. Il ne s'agit pas, dans cette introduction, d'être exhaustif sur l'ensemble des situations où l'on utilise le calcul de sensibilités mais plus de rappeler quelques utilisations courantes. La connaissance des sensibilités permet souvent d'affiner l'analyse en vue d'une meilleure compréhension des mécanismes physiques à l'oeuvre dans les systèmes. De plus les sensibilités peuvent être aussi utilisées pour optimiser un procédé (plan d'expérience, dimensionnement, etc.) en aidant l'opérateur dans sa stratégie de choix paramétriques. Les sensibilités sont aussi utiles dans toutes les procédures d'inversion (méthodes inverses) où il est souvent important de guider l'algorithmique pour accélérer les convergences [51]. On trouve aussi des applications très concrètes en météorologie, où les problèmes d'assimilation de données sont pilotés par la connaissance des sensibilités aux conditions initiales des diverses observables [52]. Ceci rejoint plus généralement l'analyse des systèmes dynamiques, où la caractérisation des comportements (chaotiques, cycle limite, asymptotique stable, etc.) se fait par calcul de grandeurs intrinsèques au modèle (exposant de Lyapunoff par exemple) que l'on peut généralement relier aux sensibilités[53]. On peut citer pour finir la possibilité d'utiliser les sensibilités pour créer des modèles de raccordement linéaires entre différents sous-modèles physiques.

Avant d'aller plus loin dans le développement, nous allons rappeler succinctement la définition classique d'une sensibilité linéaire et son interprétation en termes de perturbations.

Considérons une grandeur vectorielle quelconque \mathbf{A} définie par une fonction vectorielle \mathbf{f} telle que :

$$\mathbf{A} = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\pi}) \quad (3.0.1)$$

\mathbf{f} est une fonction des variables d'espace \mathbf{r} , du temps t et d'un ensemble de paramètres $\boldsymbol{\pi}$. La matrice de sensibilité (Jacobien) de la grandeur \mathbf{A} aux paramètres $\boldsymbol{\pi}$ est défini par :

$$\mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\pi}} = \partial_{\boldsymbol{\pi}} \mathbf{f}(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\pi}) \quad (3.0.2)$$

Si l'on imagine que l'on applique une petite modification du vecteur $\boldsymbol{\delta\pi}(<< \boldsymbol{\pi})$, on peut exprimer approximativement la grandeur perturbée comme suit :

$$\mathbf{A}_{\pi+\delta\pi} \simeq \mathbf{A}_\pi + s_{A/\pi}\delta\pi \quad (3.0.3)$$

Sur la figure 3.1 on présente schématiquement une interprétation graphique de la sensibilité explicitée comme l'écart entre la trajectoire "perturbée" et la trajectoire de référence divisée par la perturbation lorsque cette dernière tend vers zéro. Dans l'étude des systèmes dynamiques il est d'usage de différencier les sensibilités aux paramètres du modèle des sensibilités aux conditions initiales, même si fondamentalement dans la définition 3.0.2 il n'existe pas de différence de statut. On note cependant que la trajectoire temporelle des sensibilités des variables d'état aux paramètres du problème démarre à zéro à l'instant initial (exemple de s_{A/π_1} sur la figure 3.1), alors que la sensibilité des variables d'état à leur condition initiale vaut un à ce même instant[54] (s_{A/π_2} sur la figure 3.1).

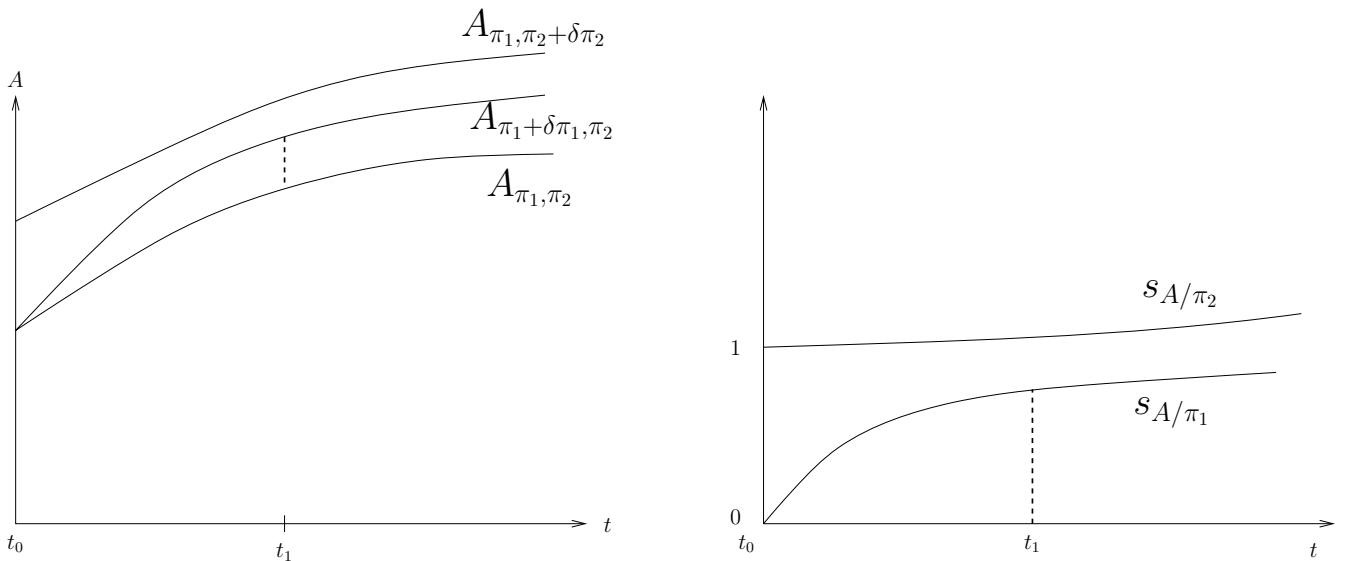


FIG. 3.1 – Interprétation graphique d'une sensibilité $s_{A/\pi}$ au paramètre π en fonction d'une perturbation $\delta\pi$

Malheureusement, la plupart du temps la fonction \mathbf{f} n'est pas connue analytiquement. La grandeur \mathbf{A} existe uniquement au travers d'un modèle mathématique dont la solution, pour des conditions données, est approchée par les techniques numériques usuelles. La dérivation directe n'étant pas possible il est nécessaire de procéder autrement si l'on veut accéder à l'information sur les sensibilités.

Cas des systèmes dynamiques : La grandeur \mathbf{A} est une fonction du vecteur des variables d'états $\boldsymbol{\eta}$, dont l'évolution temporelle est régie par un système différentiel du premier ordre en temps :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial t} = \mathbf{H}(\boldsymbol{\eta}, \pi) \quad (3.0.4)$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\eta}) \quad (3.0.5)$$

où \mathbf{H} est un opérateur potentiellement non linéaire.

A $t = t_0$ instant initial, $\boldsymbol{\eta}(t_0) = \boldsymbol{\eta}_0$ représente le vecteur des conditions initiales des variables d'état. Si l'on note $\mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0)$ et $\mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0)$ respectivement les matrices de sensibilités de \mathbf{A} et $\boldsymbol{\eta}$ au vecteur $\boldsymbol{\pi}$, en différenciant le modèle ci-dessus il est aisément d'écrire :

$$\frac{\partial \mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0)}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \boldsymbol{\pi}} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0) \quad (3.0.6)$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0) = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \boldsymbol{\eta}} \mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0) \quad (3.0.7)$$

Le modèle obtenu, que l'on nomme généralement modèle de sensibilité, peut être résolu numériquement en parallèle du modèle d'évolution (cf équations 3.0.4,3.0.5). Le système est linéaire en sensibilité et le terme $\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \boldsymbol{\eta}}$ est calculé le long de la trajectoire du vecteur d'état (fonction uniquement du temps pour un jeu donné de paramètres). On pourrait aussi bien calculer et stocker la trajectoire des états dans une première phase, puis résoudre le système en sensibilité avec cette information. Dans tous les cas, cela nécessite des calculs supplémentaires qui peuvent être source de problèmes pour des applications coûteuses en temps de calcul. Il existe cependant, dans certains cas, des possibilités de réduire astucieusement ces coûts additionnels, mais ceci sort du cadre du présent propos.

Dans l'écriture précédente, $\boldsymbol{\pi}$ est un vecteur qui inclut à la fois les paramètres physiques du problème et les conditions initiales du vecteur d'état. Cependant, si l'on s'intéresse uniquement au cas de la sensibilité aux conditions initiales ($\boldsymbol{\pi}$ est uniquement le vecteur des conditions initiales), le terme $\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \boldsymbol{\pi}}$ est nul (sauf cas très particuliers des systèmes avec retard). Supposons pour simplifier que l'on soit dans ce cas (non restrictif), et que l'on souhaite obtenir, non pas la trajectoire complète $\mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0)$ pour un jeu de conditions initiales données (t_0 donnée), mais uniquement pour un instant $t = \tilde{t}$ donné la grandeur $\mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\pi}}(\tilde{t}, t_0)$ pour laquelle $\boldsymbol{\eta}_0$ varie. Cela revient en fait à déterminer l'effet sur \mathbf{A} à un instant \tilde{t} d'une perturbation des conditions initiales (appliquée à t_0). Ceci est très similaire à ce qui précède, c'est juste le choix de l'observation qui est différente. En général pour construire la trajectoire recherchée dans ces cas, on construit le modèle adjoint au modèle d'évolution des états [52]. Sans rentrer dans une rigueur mathématique complète, on peut dériver assez simplement le modèle adjoint en réécrivant l'équation 3.0.3 sous l'hypothèse d'une perturbation infinitésimale des conditions initiales entre deux instants infiniment proche t_0 et $t_0 + \delta t_0$:

$$\delta \mathbf{A}(\tilde{t}) = \mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\eta}_0}(\tilde{t}, t_0) \delta \boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\eta}_0}(\tilde{t}, t_0 + \delta t_0) [\mathbf{1} + \partial_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{H} \delta t_0] \delta \boldsymbol{\eta}_0 \quad (3.0.8)$$

En remplaçant $\mathbf{s}_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\eta}_0}(\tilde{t}, t_0 + \delta t_0)$ par son développement linéaire autour de t_0 , il vient après quelques manipulations algébriques :

$$\partial_{t_0} \mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\eta}_0}^+(\tilde{t}, t_0) = -\partial_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{H}^+ \cdot \mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\eta}_0}^+(\tilde{t}, t_0) \quad (3.0.9)$$

où les matrices et les vecteurs transposées sont caractérisés par l'exposant $^+$. Le modèle adjoint ainsi obtenu peut être résolu pour $t_0 < \tilde{t}$ connaissant $\mathbf{s}_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\eta}_0}^+(\tilde{t}, t_0 = \tilde{t})$.

En résumé, pour calculer des sensibilités dans le cas de systèmes dynamiques, l'idée générale est de construire un modèle pour les sensibilités, avec au moins deux objectifs :

- 1) Déterminer en une seule fois (un seul calcul) le maximum de grandeurs d'intérêt, là où il faudrait autant de calculs que de grandeurs par une méthodologie de perturbation systématique

des paramètres.

2) Éviter les écueils numériques qui peuvent apparaître lorsque l'on calcule une dérivée par différence de deux termes proches en valeur.

Cas des modèles intégraux : Si \mathbf{A} est maintenant une grandeur vectorielle intégrale (toujours fonction du vecteur des variables d'état $\boldsymbol{\eta}$ et de l'ensemble des paramètres $\boldsymbol{\pi}$), le vecteur $\boldsymbol{\pi}$ apparaît alors dans la fonction à intégrer et/ou dans l'expression du domaine d'intégration :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\eta} &= \int_{\mathcal{D}(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\pi})} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t, \boldsymbol{\pi}) d\mathbf{x} \\ \mathbf{A} &= \mathbf{g}(\boldsymbol{\eta})\end{aligned}\quad (3.0.10)$$

De façon tout à fait formelle on peut, dans la même logique que celle qui a prévalu à l'établissement des modèles de sensibilités pour les systèmes dynamiques, exprimer la sensibilité par simple dérivation de l'expression :

$$\begin{aligned}s_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0) &= \partial_{\boldsymbol{\pi}} \int_{\mathcal{D}(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\pi})} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t, \boldsymbol{\pi}) d\mathbf{x} \\ s_{\mathbf{A}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0) &= \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \boldsymbol{\eta}} s_{\boldsymbol{\eta}/\boldsymbol{\pi}}(t, t_0)\end{aligned}\quad (3.0.11)$$

Dans le cadre de la simulation numérique par la méthode de Monte-Carlo¹, c'est à partir de ce type d'écriture que l'on peut développer un calcul de sensibilités. Il se pose alors la question suivante : comment peut-on adapter un algorithme de Monte-Carlo pour rendre compte des sensibilités, notamment dans le cas où les paramètres apparaissent à la fois dans les densités de probabilité de tirages et dans le domaine d'intégration ?

Nous essaierons dans ce chapitre de répondre à cette question. Nous distinguerons pour cela deux types de sensibilités :

- 1) Les sensibilités à des paramètres dont le domaine d'intégration est indépendant que nous appellerons sensibilités paramétriques.
- 2) Les sensibilités à des paramètres déformant le domaine d'intégration que nous appellerons sensibilité à la déformation du domaine.

3.1 Calcul de sensibilités paramétriques par la méthode de Monte-Carlo

La simulation numérique par la méthode de Monte-Carlo (MMC) permet le calcul simultané d'une grandeur quelconque A et de ses sensibilités $\partial_{\boldsymbol{\pi}} A$ à divers paramètres $\boldsymbol{\pi}$. Développée dans un cadre formel par Mikhailov[55, 41] et Skowronski[56, 57] (en conception assistée par ordinateur), utilisée par Vikhansky en physique du transport[58], cette possibilité, auparavant restreinte au cas où les densités de probabilités de tirage choisies pour générer les variables aléatoires sont indépendantes du paramètre, a été étendue par de Lataillade et al[10] à des

¹Nous avons vu dans le chapitre 2 que la méthode de Monte-Carlo est une méthode numérique de calcul intégral

cas plus généraux tenant compte d'une dépendance des densités de probabilité au paramètre. Pour fixer l'état de l'art sur l'estimation de sensibilités par Monte-Carlo, nous allons reprendre cette étude (détailée dans [10]) afin de présenter les principes méthodologiques de ce calcul de sensibilités paramétriques par Monte-Carlo, principes que nous développerons ensuite pour estimer des sensibilités à la déformation du domaine.

3.1.1 Principe du calcul simultané de sensibilités

Soit une grandeur intégrale $I = \int_D f(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x}$ estimée par la méthode de Monte-Carlo² :

$$\begin{aligned} I &= \int_D p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda) w(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x} = E(W) \\ &\simeq \langle W \rangle_N = \widehat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w(\mathbf{x}_i, \lambda) \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

où $w(\mathbf{x}; \lambda) = \frac{f(\mathbf{x}; \lambda)}{p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda)}$ est le poids de Monte-Carlo associé à l'estimation \widehat{I} de I . Des réalisations \mathbf{x}_i de la variable aléatoire \mathbf{X} on déduit les réalisations $w(\mathbf{x}_i, \lambda) = \frac{f(\mathbf{x}_i; \lambda)}{p_{\mathbf{X}_i}(\mathbf{x}_i; \lambda)}$ de la variable aléatoire W . Ces réalisations sont effectuées selon la densité de probabilité $p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda)$.

Considérons maintenant la sensibilité de I au paramètre λ :

$$\partial_{\lambda} I = \partial_{\lambda} \int_D f(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x} \quad (3.1.2)$$

Le domaine d'intégration D est indépendant du paramètre λ (c'est donc une sensibilité paramétrique) :

$$\partial_{\lambda} I = \int_D \partial_{\lambda} f(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x} \quad (3.1.3)$$

$\partial_{\lambda} I$ et I sont deux intégrales du même type avec le même domaine d'intégration. L'estimation par Monte-Carlo de la sensibilité de I à λ se base donc sur le même principe que pour le calcul de la grandeur I . Néanmoins, si on souhaite ajouter le calcul d'une sensibilité dans un code de calcul déjà existant pour un coût supplémentaire faible, il est nécessaire d'utiliser pour estimer la sensibilité les mêmes densités de probabilités que celles utilisées pour estimer la grandeur (nous discutons dans le paragraphe suivant de cette contrainte). On obtient donc en développant :

$$\partial_{\lambda} I = \int_D p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda) \frac{\partial_{\lambda} f(\mathbf{x}; \lambda)}{p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda)} = \int_D p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda) w_{\lambda}(\mathbf{x}; \lambda) \quad (3.1.4)$$

$w_{\lambda}(\mathbf{x}; \lambda) = \frac{\partial_{\lambda} f(\mathbf{x}; \lambda)}{p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda)}$ est le poids (ou la fonction poids) de Monte-Carlo associé au calcul de la dérivée. Les fonctions poids de Monte-Carlo $w(\mathbf{x}; \lambda)$ associé à l'estimation de I et $w_{\lambda}(\mathbf{x}; \lambda)$ associé à l'estimation de $\partial_{\lambda} I$ sont liées par[10] :

$$w_{\lambda} = \partial_{\lambda} w + w \frac{\partial_{\lambda} p_{\mathbf{X}}}{p_{\mathbf{X}}} \quad (3.1.5)$$

On remarque que si la densité de probabilité $p_{\mathbf{X}}$ ne dépend pas du paramètre λ , le calcul du poids de Monte-Carlo associée à la sensibilité consiste simplement à dériver w . Toujours sur

²Le principe de l'estimation de ce type d'intégrale est décrit plus précisément dans le chapitre précédent au paragraphe 2.2.2

le même principe que pour l'estimation de I , on estime la sensibilité de I à λ par la valeur moyenne $\langle W_\lambda \rangle_N$ de la variable aléatoire W_λ ³ :

$$\partial_\lambda I = E(W_\lambda) \simeq \langle W_\lambda \rangle_N = \widehat{\partial_\lambda I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_\lambda(\mathbf{x}_i) \quad (3.1.6)$$

On estime aussi l'incertitude statistique de l'estimateur $\widehat{\partial_\lambda I}$ par :

$$\begin{aligned} \sigma_{\widehat{\partial_\lambda I}} &= \sigma_{\langle W_\lambda \rangle_N} = \sqrt{\frac{E(W_\lambda^2) - E(W_\lambda)^2}{N}} \\ &\simeq \sqrt{\frac{\langle W_\lambda^2 \rangle_N - \langle W_\lambda \rangle_N^2}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_\lambda^2(x_j) - \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_\lambda(x_j) \right)^2} \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

3.1.2 Remarques

A partir de la proposition précédente, il est possible de calculer une grandeur et ses sensibilités aux paramètres pour peu que ces derniers soient indépendants du domaine d'intégration. Grâce à l'utilisation des mêmes densités de probabilité, les séries de réalisations $w(\mathbf{x}_i)$ et $w_\lambda(\mathbf{x}_i)$ (permettant l'estimation de la grandeur et de ses sensibilités) sont déduites des mêmes séries de réalisations $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,N}$. Le calcul des sensibilités et le calcul de la grandeur sont donc simultanés puisqu'il n'est pas nécessaire de refaire des séries de générations pseudo-aléatoires (ni de calculs de suivis de rayons dans les applications radiatives). Or dans de nombreux cas, les coûts en temps de calcul de la méthode de Monte-Carlo sont essentiellement dûs aux procédures d'obtention des réalisations d'une variable aléatoire : générations pseudo-aléatoires d'un nombre dans $[0, 1]$ et passage de ce nombre à la réalisation de la variable. Prenons l'exemple du tirage aléatoire d'une position d'extinction (par diffusion ou par absorption) lors d'un calcul en transferts radiatifs (cet exemple de tirage aléatoire est décrit dans le chapitre précédent, paragraphe 2.2.1). Si on considère un système tridimensionnel, le passage d'un nombre $R_\sigma \in [0, 1]$ à l'abscisse curviligne σ de cette position d'extinction du photon s'écrit⁴ :

$$R_\sigma = \int_0^\sigma (k_d(l) + k_a(l)) \exp(-\tau(l)) dl = 1 - \exp(-\tau(\sigma)) \quad (3.1.8)$$

où $\tau(\sigma) = \int_0^\sigma (k_d + k_a) dl$ est l'épaisseur optique du milieu de propagation le long de la trajectoire du photon considéré. La connaissance de cette épaisseur optique $\tau(\sigma)$ implique la connaissance des propriétés du milieu le long du rayon. Si le système est découpé en mailles, le calcul des intersections du rayon avec les mailles impliquées peut s'avérer coûteux lorsque la géométrie est multidimensionnelle. De plus, si le nombre de mailles est grand (comme dans le cas des maillages utilisés pour des simulations numériques en dynamique des fluides), l'accès aux informations concernant chaque maille (ses propriétés physiques, sa taille etc.) peut être lourd en temps de calcul. Dans de telles applications, le calcul de la fonction poids est peu coûteux en comparaison des coûts impliqués par les calculs géométriques liés aux tirages aléatoires. Le temps supplémentaire dû à l'estimation des sensibilités est alors quasi-négligeable. D'un autre côté, si la fonction

³Cette valeur moyenne $\langle W_\lambda \rangle_N$ a été obtenue à l'aide de N réalisations aléatoires $w_\lambda(\mathbf{x}_i)|_{\{i=1,N\}}$ de W_λ

⁴On reprend les mêmes notations que celles utilisées dans le paragraphe 2.2.1

poids est délicate à calculer et que le calcul de la série de réalisations des variables aléatoires est relativement rapide, alors le temps ajouté devient plus important. Ainsi en fonction des applications envisagées, le pourcentage de temps supplémentaire impliqué par une estimation de sensibilités est très variable. Nous verrons cependant que dans toutes les applications que nous avons considérées, il reste toujours nettement inférieur au temps nécessaire pour estimer une sensibilité par une méthode standard de perturbations consistant à faire plusieurs simulations en faisant varier le paramètre étudié. De plus, si l'on souhaite obtenir une incertitude précise avec une méthode standard de différentiation numérique (basée sur des calculs par MMC), il est nécessaire d'augmenter le nombre d'échantillons N de manière significative au point que la mise en oeuvre d'une telle méthodologie est souvent irréalisable⁵.

Du fait que l'on utilise les mêmes densités de probabilités pour estimer les sensibilités que celles utilisées pour estimer la grandeur, la question de la convergence du calcul de sensibilités se pose. Un choix de densités de probabilité adapté au calcul d'une grandeur n'est pas forcément adapté au calcul des sensibilités de cette grandeur aux paramètres. Par exemple, considérons le cas décrit dans [10] où l'intégrale à estimer est de la forme

$$I = \int_D f(x; \lambda) dx = \int_D (\alpha + \lambda g(x)) dx$$

où α est une constante et g une fonction quelconque de x indépendante du paramètre λ . Dans le cas $\lambda = 0$, $f(x; 0) = \alpha$. Si

$$p_X = \frac{1}{\int_D dx}$$

est choisi uniforme sur D , le poids de Monte-Carlo associé au calcul de I s'écrit :

$$w(x; 0) = \frac{\alpha}{p_X}$$

Ce poids est indépendant de x et l'écart-type σ_I est alors nul :

$$\sigma_I = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\int_D w(x; 0)^2 dx - \left(\int_D w(x; 0) dx \right)^2} = 0 \quad (3.1.9)$$

Cela correspond à une optimisation idéale de l'estimation de I . En ce qui concerne l'estimation de la sensibilité, si on choisit la même densité de probabilité p_X , le poids de Monte-Carlo $w_\lambda(x; \lambda) = \frac{g(x)}{p_X}$ n'est pas indépendant de x . L'écart-type associé à l'estimation de $\partial_\lambda I$ s'écrit :

$$\widehat{\sigma_{\partial_\lambda I}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\int_D w_\lambda(x; 0)^2 dx - \left(\int_D w_\lambda(x; 0) dx \right)^2} = \frac{1}{\sqrt{N p_X}} \sqrt{\int_D g^2(x) dx - \left(\int_D g(x) dx \right)^2}$$

Cet écart-type est dépendant de la fonction $g(x)$ et peut donc ne pas être satisfaisant. Cet exemple caricatural permet simplement d'illustrer le fait que les incertitudes statistiques sur l'estimation de la grandeur et de ses sensibilités peuvent être totalement décorrélées. Dans les

⁵Le caractère statistique de la méthode rend très difficile le calcul des écarts entre deux valeurs très proche de la grandeur considérée. Des résultats comparatifs des temps de calcul et des incertitudes sont donnés dans ce chapitre dans les paragraphes 3.3.1 et 3.3.2 lors de calcul de sensibilités à la déformation du domaine par une méthode standard et par une méthode d'estimation simultanée

exemples d'applications physiques que nous avons traités jusqu'ici, la convergence du calcul des sensibilités a généralement été satisfaisante. Si dans certains cas l'écart-type relatif de l'estimateur de la sensibilité est supérieur à celui de la grandeur, cette erreur statistique reste cependant beaucoup plus faible à coûts numériques équivalents qu'avec une approche standard (par différentiation numérique).

3.1.3 Influence de la formulation sur le calcul de sensibilité

Nous avons vu dans le chapitre précédent que la formulation intégrale d'une grandeur pouvait être associée à un algorithme de MMC spécifique et qu'en conséquence un exercice de reformulation s'accompagnait d'un changement d'algorithme. Dans ce paragraphe, nous allons discuter des conséquences de cette "association" d'un algorithme et d'une écriture intégrale dans le cas du calcul de sensibilité. Nous choisissons pour cela de présenter un exemple très simple en rayonnement, le calcul d'un facteur de forme F_{12} entre deux surfaces, qui nous permet d'illustrer les difficultés que l'on peut rencontrer.

Problème posé par la dérivée d'une fonction échelon Le facteur de forme F_{12} entre deux surfaces S_1 et S_2 peut se calculer à l'aide d'un algorithme analogue consistant à générer aléatoirement avec une densité de probabilité uniforme un point \mathbf{r}_1 sur la surface S_1 , puis une direction \mathbf{u} avec une densité de probabilité suivant la loi de Lambert. L'estimation du facteur de forme s'obtient finalement en évaluant le pourcentage de rayons ayant atteint la surface S_2 . L'intégrale correspondant à cet algorithme s'écrit :

$$F_{12} = \frac{1}{A_1} \int_{S_1} dS_1(\mathbf{r}_1) \int_{2\pi} d\Omega(\mathbf{u}) \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi} \mathcal{H}(\mathbf{u} \in \Omega_{12}) \quad (3.1.10)$$

où A_1 est l'aire de la surface S_1 de normale \mathbf{n} , Ω_{12} est l'angle solide sous lequel on voit la surface S_2 depuis le point \mathbf{r}_1 . La fonction $\mathcal{H}(\mathbf{u} \in \Omega_{12})$ est une fonction échelon égale à l'unité si la condition $\mathbf{u} \in \Omega_{12}$ est respectée, nulle autrement. La fonction à intégrer s'exprime par

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}) = \frac{1}{A_1} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi} \mathcal{H}(\mathbf{u} \in \Omega_{12}) \quad (3.1.11)$$

Les densités de probabilités s'écrivent :

$$\begin{aligned} p_{S_1}(\mathbf{r}_1) &= \frac{1}{A_1} \\ p_U(\mathbf{u}) &= \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi} \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

et le poids correspondant devient :

$$w = \mathcal{H}(\mathbf{u} \in \Omega_{12}) \quad (3.1.13)$$

Si on s'intéresse à la sensibilité de ce facteur de forme à la distance h entre les deux surfaces,

$$\partial_h F_{12} = \frac{1}{A_1} \int_{S_1} dS_1(\mathbf{r}_1) \int_{2\pi} d\mathbf{u} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi} \partial_h \mathcal{H}(\mathbf{u} \in \Omega_{12}) \quad (3.1.14)$$

seul l'angle solide Ω_{12} est dépendant de ce paramètre. La dérivée de la fonction échelon $\partial_h \mathcal{H}$ est égale à une distribution de Dirac rendant la formulation intégrale totalement inadaptée

à un algorithme de Monte-Carlo⁶. De plus on ne peut pas utiliser cette fonction Dirac pour réécrire l'expression de la sensibilité puisque cela impliquerait un changement de la dimension du domaine d'intégration⁷ impliquant à son tour un changement d'algorithme⁸. Dans une telle situation, la méthodologie de calcul de sensibilité décrite précédemment est a priori inapplicable.

Traitement de $\partial_h F_{12}$ par un travail de reformulation Nous allons à l'aide d'un travail de reformulation intégrale contourner les problèmes posés par la dérivée de la fonction échelon. La formulation de F_{12} donnée par l'équation 3.1.10 est équivalente à la formulation suivante :

$$F_{12} = \frac{1}{A_1} \int_{S_1} dS_1(\mathbf{r}_1) \left\{ \int_{\Omega_{12}} d\mathbf{u} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi} + \int_{2\pi - \Omega_{12}} d\mathbf{u} 0 \right\} \quad (3.1.17)$$

Cette reformulation permet l'écriture intégrale suivante de la sensibilité $\partial_h F_{12}$:

$$\partial_h F_{12} = \frac{1}{A_1} \int_{S_1} dS_1(\mathbf{r}_1) \partial_h \left\{ \int_{\Omega_{12}} d\mathbf{u} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi} + \int_{2\pi - \Omega_{12}} d\mathbf{u} 0 \right\} \quad (3.1.18)$$

Deux problèmes se posent alors :

– Le premier problème est lié à la correspondance stricte entre un algorithme et une formulation intégrale. Les domaines d'intégrations $S_1 \times (\Omega_{12} \cup (2\pi - \Omega_{12}))$ et $S_1 \times 2\pi$ des intégrales 3.1.17 et 3.1.10 sont identiques même si ces deux intégrales sont formulées différemment. Ceci nous conduit à nous poser la question suivante : cette réécriture de F_{12} implique-t-elle nécessairement un changement d'algorithme ? Si la réponse à cette question est non alors la correspondance entre un algorithme et une écriture intégrale que nous avons présentée au chapitre précédent nécessite un approfondissement.

– Le second problème est lié au fait que les deux sous-domaines Ω_{12} et $2\pi - \Omega_{12}$ dépendent

⁶Une distribution de Dirac $\delta(x - y)$ est défini par :

$$\int \delta(x - y) dx = y$$

La fonction Dirac $\delta(x - y)$ se traduit par le fait que seul l'évènement $x = y$ est possible et que $\forall x \neq y$, l'intégrale est nulle. Un algorithme de Monte-Carlo va consister à balayer de manière statistique l'ensemble des évènements x possibles sur l'ensemble D . Lorsqu'une fonction Dirac apparaît dans la formulation, ce balayage devient alors impossible puisque la zone de contribution non nulle est de support nul.

⁷On sait que par définition d'une fonction Dirac δ , on a dans le cas d'une intégrale simple :

$$\int_D f(x) \delta(x - y) dx = f(y) \quad (3.1.15)$$

où f est une fonction quelconque. Dans le cas d'une intégrale multiple cette relation se traduit par l'écriture intégrale suivante :

$$\int_{D_1} dx_1 \dots \int_{D_{n-1}} dx_{n-1} \int_{D_n} dx_n f(x_1, \dots, x_{n-1}, x_n) \delta(x_n - y) = \int_{D_1} dx_1 \dots \int_{D_{n-1}} dx_{n-1} f(x_1, \dots, x_{n-1}, y) \quad (3.1.16)$$

Le nouveau domaine d'intégration a une dimension de moins après la reformulation.

⁸On ne peut utiliser la même séquence de générations aléatoires pour le calcul de deux grandeurs distinctes que si les deux grandeurs peuvent s'écrire comme deux intégrales de même domaine d'intégration (cf le paragraphe 2.2.3 du chapitre précédent où l'on discute de l'association entre une formulation intégrale et un algorithme de Monte-Carlo)

chacun du paramètre (même si leur union n'en dépend pas) : l'expression 3.1.17 de F_{12} nous conduit donc à définir $\partial_h F_{12}$ comme une sensibilité à la déformation du domaine. Ce problème nous renvoie à la question posée en introduction et qui était : comment peut-on adapter un algorithme de Monte-Carlo pour rendre compte des sensibilités, dans le cas où les paramètres apparaissent à la fois dans le poids, dans les densités de probabilité de tirages et dans le domaine d'intégration ? La méthodologie décrite au paragraphe 3.1.1 donne un premier élément de réponse en montrant comment traiter la dépendance du poids et des densités de probabilités de tirages au paramètre (voir l'équation 3.1.5 où cette dépendance est prise en compte dans la fonction poids de Monte-Carlo associée au calcul de la sensibilité) mais n'est plus applicable lorsque le domaine d'intégration dépend du paramètre.

Nous discuterons de ces problèmes dans la suite de ce chapitre.

Traitement de $\partial_h F_{12}$ à l'aide d'un changement de variable Cependant, il est possible d'éviter ces questions relatives à la dépendance du domaine d'intégration à h si on effectue le changement de variable aboutissant à l'expression suivante du facteur de forme :

$$F_{12} = \frac{1}{A_1} \int_{S_1} dS_1(\mathbf{r}_1) \int_{S_2} dS_2(\mathbf{r}_2) \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})^2}{\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^2} \quad (3.1.19)$$

où $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \frac{h}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|}$ (voir la figure 3.2). L'algorithme de Monte-Carlo associé à cette formulation consiste à générer un point \mathbf{r}_1 sur la surface S_1 , un point \mathbf{r}_2 sur la surface S_2 puis à associer à chaque rayon $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]$ le poids de Monte-Carlo correspondant. La fonction à intégrer devient :

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{A_1} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})^2}{\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^2} \quad (3.1.20)$$

Les densités de probabilités choisies sont uniformes :

$$\begin{aligned} p_{S_1}(\mathbf{r}_1) &= \frac{1}{A_1} \\ p_{S_2}(\mathbf{r}_2) &= \frac{1}{A_2} \end{aligned} \quad (3.1.21)$$

et le poids correspondant devient :

$$w = \frac{A_2 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})^2}{\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^2} \quad (3.1.22)$$

Avec cette formulation, les problèmes de dérivabilité ont disparu. Le nouveau domaine d'intégration $S_1 \times S_2$ ne dépendant pas de h , la sensibilité à h est une sensibilité paramétrique et peut se calculer avec l'algorithme décrit précédemment. La figure 3.3 présente les résultats obtenus avec les barres d'erreur associées.

Discussion Ainsi, en nous basant sur trois expressions différentes de F_{12} (cf équations 3.1.10, 3.1.17 et 3.1.19), nous arrivons à trois conclusions différentes quant au calcul de la sensibilité $\partial_h F_{12}$: dans le premier cas, le calcul simultanée de F_{12} et de sa sensibilité est inapplicable puisque le domaine d'intégration de la sensibilité diffère de celui de F_{12} à cause de la dérivée d'une fonction échelon, dans le deuxième cas $\partial_h F_{12}$ est une sensibilité à la déformation du domaine et dans le troisième cas $\partial_h F_{12}$ est une sensibilité paramétrique.

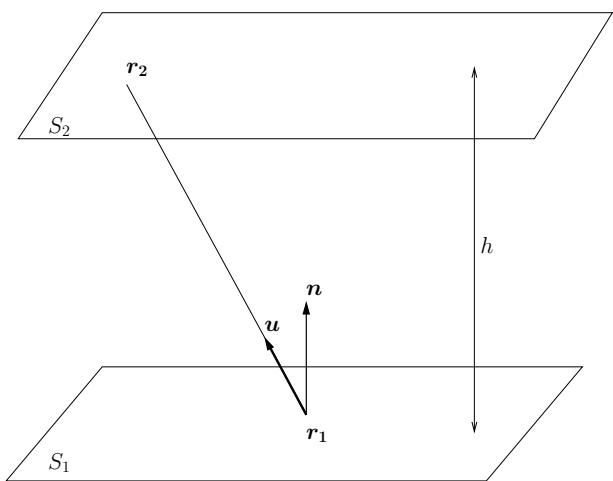


FIG. 3.2 – Représentation des deux surfaces S_1 et S_2 parallèles, description des notations.

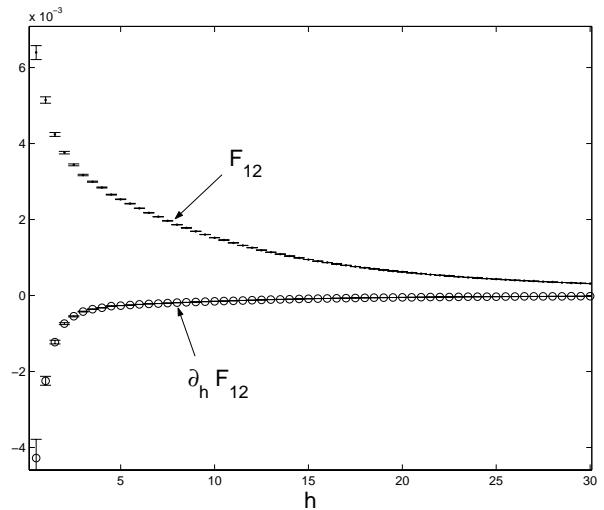


FIG. 3.3 – F_{12} et sa sensibilité $\partial_h F_{12}$ en fonction de h . Le nombre d'échantillons effectués par calcul est $N = 10^5$.

On en déduit en particulier qu'un choix adéquat de formulation peut permettre de contourner les difficultés posées par la dépendance du domaine d'intégration au paramètre ou par les dérivées des fonctions échelons. Cependant, un changement de variable implique un changement d'algorithme ce qui est incompatible avec un de nos principaux objectifs : pouvoir ajouter des calculs de sensibilités sur un code déjà existant. D'autre part, lorsque les domaines d'intégration sont de dimensions plus grandes⁹ un changement de variable annulant la dépendance de ce domaine au paramètre étudié est souvent impossible ou trop difficile à effectuer.

Pour ces raisons, nous nous sommes intéressés aux cas où les paramètres servent à définir le domaine d'intégration et nous proposons dans la suite de ce chapitre une extension de cette méthodologie de calcul de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo au calcul de sensibilités à la déformation du domaine (que nous appellerons aussi sensibilité au domaine). Nous discuterons en fin de chapitre (paragraphe 3.3.2) des cas où l'expression de la sensibilité est problématique à cause des dérivées de fonctions échelons.

3.2 Extension au calcul de sensibilités à la déformation du domaine

La proposition présentée ci-après est une reprise étendue de :

Monte Carlo estimates of domain-deformation sensitivities ; M. Roger, S. Blanco, M. El Hafi, R. Fournier ; Physical Review Letter, vol 95, 2005[59]

⁹Par exemple en transferts radiatifs lorsque des phénomènes de réflexions ou de diffusions multiples sont pris en compte, les domaines d'intégrations ont une dimension infinie (cf paragraphe 2.1.4 et 3.3.2)

Question : Considérons l'intégrale I :

$$I = \int_{D(\lambda)} f(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x}$$

où le domaine d'intégration dépend du paramètre λ . Le problème posé est d'estimer par MMC la grandeur :

$$\partial_\lambda I = \partial_\lambda \int_{D(\lambda)} f(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x}$$

en tenant compte de la déformation du domaine en fonction du paramètre.

3.2.1 Principe

Le principe de l'estimation de sensibilités à la déformation du domaine (ou sensibilités au domaine) par Monte-Carlo est basé sur les mêmes principes que ceux décrits pour l'estimation de sensibilités paramétriques. Pour exprimer la dérivée de I par rapport au paramètre λ , on suppose qu'au voisinage de la valeur du paramètre, l'évolution du domaine d'intégration D avec λ est dérivable et préserve sa topologie. On suppose aussi que la frontière ∂D du domaine D est une hypersurface régulière par morceau. Sous ces hypothèses, la dérivée de I par rapport à λ s'écrit :

$$\partial_\lambda I = \int_D \partial_\lambda f(\mathbf{x}) dx + \int_{\partial D} f(\mathbf{y}) \mathbf{V}_\lambda(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (3.2.1)$$

où $\mathbf{n}(\mathbf{y})$ est le vecteur normal sortant au point \mathbf{y} sur la frontière ∂D . $\mathbf{V}_\lambda(\mathbf{y})$ est un champ vectoriel à la frontière ∂D du domaine D représentant la déformation de cette frontière en fonction d'une perturbation du paramètre λ . Ce champ à la frontière ∂D du domaine n'est soumis qu'à une seule contrainte que l'on peut décrire de la manière suivante :

Contrainte sur le champ \mathbf{V}_λ à la frontière du domaine ∂D [60] Un domaine $D(\lambda)$ dans \mathbb{R}^n peut toujours être défini par :

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n | g(\mathbf{x}, \lambda) < 0\} \quad (3.2.2)$$

où $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est ici C_1 en λ . La condition C_1 est liée à la contrainte de dérivation précédente concernant l'évolution de D avec λ . L'égalité $g(\mathbf{x}, \lambda) = 0$ décrit les bords du domaine ∂D . Pour \mathbf{x} à la frontière, la vitesse \mathbf{V}_λ vérifie :

$$\frac{d}{du} g(\mathbf{x} + u\mathbf{V}_\lambda, \lambda + u) \Big|_{u=0} = 0 \quad (3.2.3)$$

où u décrit une variation du paramètre λ , \mathbf{V}_λ traduisant l'influence de cette variation sur \mathbf{x} . Aussi, on appellera dorénavant le champ \mathbf{V}_λ la vitesse de déformation du domaine.

L'équation 3.2.3 est la seule contrainte sur le choix de cette vitesse. Elle fixe seulement la composante normale de la vitesse à la frontière ∂D (voir figure 3.4). Si \mathbf{W} est un champ de vecteur tangentiel à ∂D , $\mathbf{V}_\lambda + \mathbf{W}$ est aussi une solution, c'est-à-dire qu'il existe une infinité de champs de vitesse de déformation rendant compte de la même déformation du domaine. Cette propriété offre une liberté sur le choix de \mathbf{V}_λ à la frontière dont nous discuterons ultérieurement.

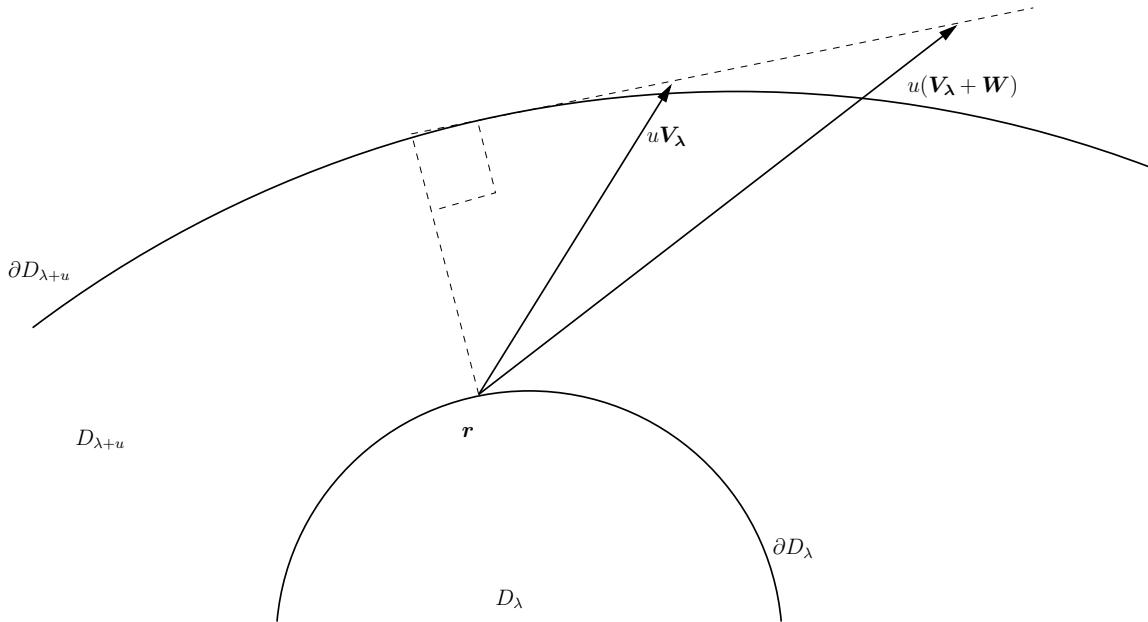


FIG. 3.4 – Liberté sur le choix de la composante tangentielle de la vitesse à la frontière du domaine

Un des points forts de la méthodologie présentée précédemment (au paragraphe 3.1) est de permettre le calcul en même temps des grandeurs et de leurs sensibilités en utilisant le même jeu de réalisations aléatoires. Pour cela, le domaine d'intégration des sensibilités à la déformation du domaine doit rester le même que celui de la grandeur concernée. La méthodologie de calcul de sensibilité par la méthode de Monte-Carlo ne peut donc pas être appliquée à partir de l'équation 3.2.1 puisque la sensibilité s'exprime par la somme d'une intégrale sur D et d'une intégrale sur sa frontière ∂D . Ce dernier terme nécessiterait le développement d'un nouvel algorithme adapté au domaine d'intégration ∂D . Aussi, nous nous servons du théorème de Gauss-Green-Ostrogradski pour remplacer l'intégrale sur ∂D par une intégrale sur D . L'énoncé de ce théorème est rappelé ci-dessous :

Théorème de la divergence ou théorème de Gauss-Green-Ostrogradski Si ∂D est une hypersurface de dimension $n - 1$, d'élément $d\mathbf{y}$ et bordant un hyperespace D de dimension n et d'élément $d\mathbf{x}$, alors pour tout champ vectoriel \mathbf{F} dérivable, on a

$$\int_D \nabla \cdot \mathbf{F} d\mathbf{x} = \int_{\partial D} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{y} \quad (3.2.4)$$

où \mathbf{n} est le vecteur unité normal à ∂D sortant de D .

L'application de ce théorème permet de récrire 3.2.1 comme :

$$\partial_\lambda I = \int_D \left[\partial_\lambda f(\mathbf{x}) + \nabla \cdot (f(\mathbf{x}) \mathbf{V}_\lambda(\mathbf{x})) \right] d\mathbf{x} \quad (3.2.5)$$

où l'opérateur ∇ a la même dimension que D . Cette expression est la somme de deux termes : par analogie avec un bilan physique, un premier terme “source” $\partial_\lambda f$ décrit la création ou la disparition de la quantité représentée par f à l'intérieur du domaine D , le second terme $\nabla \cdot (f \mathbf{V}_\lambda)$ décrit le flux de f sortant et entrant dans le domaine à travers sa frontière ∂D .

La sensibilité de I au paramètre λ s'exprime ainsi comme une intégrale unique sur le domaine D . Cependant l'application de cette formule dans l'algorithme de calcul simultané de sensibilité par Monte-Carlo implique l'extension de la vitesse de déformation du domaine (existant jusqu'à présent seulement à la frontière ∂D) sur tout le domaine D . Il faut donc construire \mathbf{V}_λ dans D en tenant compte de la seule condition donnée par l'équation 3.2.3 à la frontière ∂D puisque l'extension du champ de vitesse de ∂D à D n'est elle soumise à aucune contrainte mathématique si ce n'est la continuité à la frontière et des questions de dérivabilité dans le champ. Nous avons donc une liberté mathématique quasi-totale sur la construction de \mathbf{V}_λ dans $D - \partial D$.

Remarque Si on dispose d'une transformation \mathbf{T}_λ compatible avec la déformation traitée, alors une vitesse possible est simplement $\mathbf{V}_\lambda = \frac{dT_\lambda}{d\lambda}$ (de manière analogue au traitement de déformations en physique des milieux continus[61]). Dans le paragraphe 3.2.2 ci-après, nous discutons plus en détail de la construction de cette vitesse de déformation du domaine.

On reprend donc les mêmes principes pour estimer $\partial_\lambda I$ que pour l'estimation de sensibilités paramétriques, en ajoutant cette fois le terme supplémentaire lié à la déformation du domaine. Si $p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda)$ est la densité de probabilité utilisée pour estimer I

$$I = \int_{D(\lambda)} p_{\mathbf{X};\lambda}(\mathbf{x}; \lambda) w(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x} \quad (3.2.6)$$

où $w(\mathbf{x}; \lambda) = \frac{f(\mathbf{x}; \lambda)}{p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda)}$ est le poids de Monte-Carlo associé au calcul de I , on obtient (en utilisant la même densité de probabilité) :

$$\partial_\lambda I = \int_D p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}; \lambda) w_\lambda(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x} \quad (3.2.7)$$

où le poids de Monte-Carlo $w_\lambda(\mathbf{x}; \lambda)$ associé au calcul de la sensibilité est relié au poids $w(\mathbf{x}; \lambda)$ par la relation suivante :

$$w_\lambda = \partial_\lambda w + w \frac{\partial_\lambda p_X}{p_X} + \frac{\nabla.(w p_{\mathbf{X}} \mathbf{V}_\lambda)}{p_{\mathbf{X}}} \quad (3.2.8)$$

On remarque donc en comparant avec l'équation 3.1.5 (donnant la relation entre le poids de Monte-Carlo associé au calcul d'une sensibilité paramétrique et le poids associé au calcul de la grandeur concerné) que seul le terme $\frac{\nabla.(w p_{\mathbf{X}} \mathbf{V}_\lambda)}{p_{\mathbf{X}}}$ a été ajouté. Avec la même série de réalisations $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,N}$ dont a été déduite une série de réalisations $\{w_i\}_{i=1,N}$ de la variable aléatoire W (dont la valeur moyenne $\langle W \rangle_N$ sert d'estimateur de I), on déduit une série de réalisations $\{w_{\lambda,i}\}_{i=1,N}$ de la variable aléatoire W_λ et on estime la sensibilité $\partial_\lambda I$ et son incertitude (cf équations 3.1.6 et 3.1.7).

A travers la distribution de la variable aléatoire W_λ , l'erreur statistique dépend (comme σ_I) du nombre N de réalisations et de la densité de probabilité $p_{\mathbf{X}}$. Mais dans le cas d'une sensibilité au domaine, s'ajoute aussi une dépendance au choix de la vitesse de déformation \mathbf{V}_λ du domaine. Ainsi, au paragraphe 3.1.2, nous avions vu qu'une densité de probabilité, adaptée à une grandeur, n'est pas nécessairement adaptée à sa sensibilité. Dans le cas d'une sensibilité paramétrique, ce type de difficulté ne pouvait pas être contourné¹⁰. Pour une sensibilité au

¹⁰Aucun degré de liberté ne permettait d'agir indépendamment sur la convergence de I et de sa sensibilité

domaine, cette liberté sur le choix de \mathbf{V}_λ peut permettre d'optimiser le calcul de la sensibilité. Cet objectif concernant la convergence des résultats nous impose donc un choix judicieux de \mathbf{V}_λ dont nous discutons maintenant.

3.2.2 Discussion sur le choix de la vitesse de déformation et proposition d'une démarche systématique

Précédemment, nous avons montré qu'il existe une infinité de champs de vitesse permettant de résoudre l'équation 3.2.5 puisque seule une contrainte sur la composante normale de la vitesse sur la frontière du domaine d'intégration est imposée. D'après l'équation 3.1.7, ce choix de la vitesse va influer sur les incertitudes associées au calcul de la sensibilité au domaine $\partial_\lambda I$. L'idéal serait de trouver une expression de \mathbf{V}_λ permettant de minimiser la variance de W_λ pour la convergence du calcul de sensibilité. Dans le cadre de cette étude, nous ne répondrons pas à la question liée à la recherche d'un tel optimum à travers le choix de \mathbf{V}_λ . Cette question est à priori dépendante du problème considéré et la proposition d'une méthodologie d'optimisation générale restera une des perspectives de la présente étude. Nous nous fixons comme objectif de trouver une procédure systématique de calcul de la vitesse applicable à tous les types d'intégrales, en essayant d'introduire le moins possible de source spécifique de fluctuation de W_λ . Dans cet esprit, nous nous sommes intéressé à la solution du problème de Dirichlet, c'est-à-dire au champ de vitesse résolvant l'équation de Laplace¹¹ :

$$\Delta \mathbf{V}_\lambda = \mathbf{0} \quad (3.2.9)$$

Cette solution est a priori séduisante puisqu'elle a la particularité d'éviter les fortes variations locales de \mathbf{V}_λ ¹². De plus, elle est systématique (applicable à tous les types d'intégrales) puisque de nombreux algorithmes permettent de résoudre numériquement l'équation 3.2.9 lorsque sa solution n'est pas accessible analytiquement. Le problème lié à cette solution est que lorsque le domaine d'intégration augmente, la résolution numérique de cette équation entraîne des temps de calcul importants, totalement incompatibles avec les objectifs de notre étude.

Proposition d'une démarche systématique

Nous avons donc cherché une expression de \mathbf{V}_λ qui puisse se calculer analytiquement, applicable à tous les types d'intégrales et assez régulière pour ne pas introduire de source de variance sur l'estimateur $\widehat{\partial_\lambda I}$.

Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'association d'une formulation intégrale et d'un algorithme de Monte-Carlo conduisait à l'écriture d'une intégrale de dimension n comme une succession de n intégrales simples. Ainsi la sensibilité d'une intégrale I (estimée par MMC),

¹¹A partir d'un champ de vitesse à la frontière satisfaisant les contraintes de bord que nous nous sommes données (la composante tangentielle de la vitesse a été fixée en tout point de la frontière), on cherche l'extension unique des vitesses dans le reste du domaine qui assure en tout point la relation 3.2.9

¹²On peut montrer que ce champ de vitesse a la particularité d'être borné par les maxima des vitesses aux bords du domaine et de minimiser $\int_D \|\nabla \mathbf{V}_\lambda\|^2 d\mathbf{x}$

à un paramètre λ peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned}\partial_\lambda I &= \int_{D(\lambda)} p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) w_\lambda(\mathbf{x}; \lambda) d\mathbf{x} \\ &= \int_{D_1(\lambda)} dx_1 \int_{D_2(x_1; \lambda)} dx_2 \dots \int_{D_n(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}; \lambda)} dx_n p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) w_\lambda(\mathbf{x}; \lambda)\end{aligned}\quad (3.2.10)$$

où la variable d'intégration \mathbf{x} sur D est décomposée en n variables d'intégration scalaires : $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ sur $D = D_1 \times D_2 \times \dots \times D_n$. $D_1(\lambda)$ est l'espace de toutes les valeurs possibles de x_1 indépendamment des autres coordonnées. $D_i(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}; \lambda)$ est l'espace de toutes les valeurs possibles de x_i , connaissant les $i - 1$ premières coordonnées $(x_1, x_2, \dots, x_{i-1})$. Chaque sous-domaine D_i est monodimensionnel et égal à l'union de m_i intervalles :

$$D_i = [a_{i1}, b_{i1}] \cup [a_{i2}, b_{i2}] \cup \dots \cup [a_{im_i}, b_{im_i}] \quad (3.2.11)$$

Sur la figure 3.5, est représenté un exemple de domaine bidimensionnel quelconque. Intéressons-

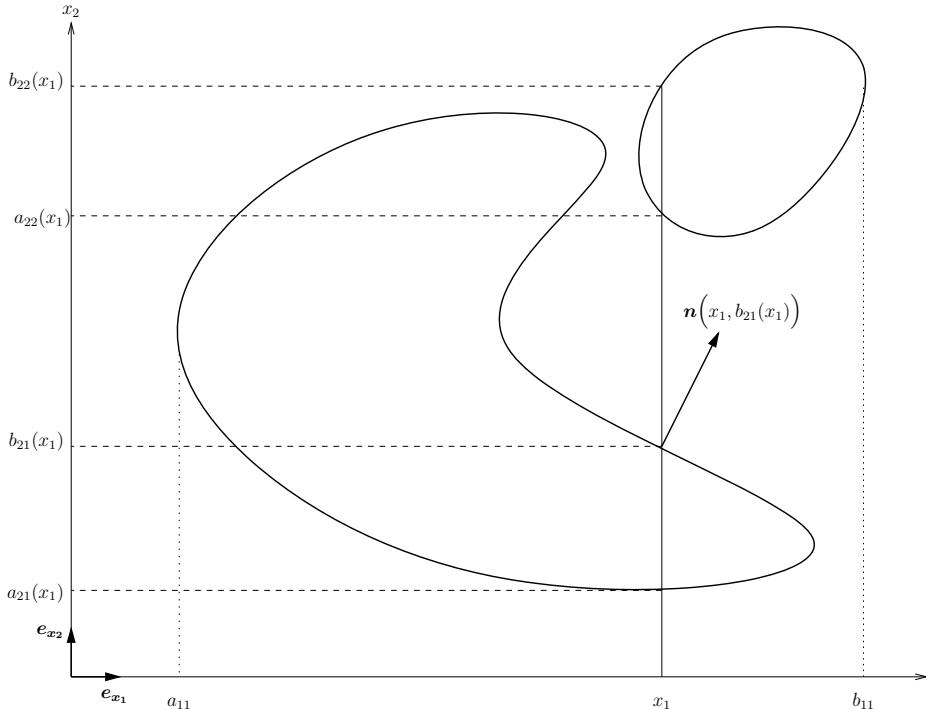


FIG. 3.5 – Exemple d'un domaine d'intégration D non connexe à deux dimensions : $D = D_1 \times D_2$ où $D_1 = [a_{11}, b_{11}]$ et $D_2 = [a_{21}(x_1), b_{21}(x_1)] \cup [a_{22}(x_1), b_{22}(x_1)]$.

nous à ce domaine et à sa déformation selon une perturbation d'un paramètre λ . La vitesse de déformation peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\mathbf{V}_\lambda(\lambda, x_1, x_2) = V_{\lambda,1}(\lambda, x_1, x_2) \mathbf{e}_{x_1} + V_{\lambda,2}(\lambda, x_1, x_2) \mathbf{e}_{x_2} \quad (3.2.12)$$

Nous avons vu précédemment qu'il existe une seule contrainte sur $\mathbf{V}_\lambda(\lambda, x_1, x_2)$ qui fixe la composante normale de cette vitesse à la frontière du domaine. Par exemple, au point (x_1, b_{21}) sur la frontière du domaine D de la figure 3.5, $\mathbf{V}_\lambda(\lambda, x_1, b_{21}) \cdot \mathbf{n}(x_1, b_{21})$ est imposé. Notons $C = \mathbf{V}_\lambda(\lambda, x_1, b_{21}) \cdot \mathbf{n}(x_1, b_{21})$. On déduit de cette contrainte la relation $V_{\lambda,1} \mathbf{e}_{x_1} \cdot \mathbf{n} + V_{\lambda,2} \mathbf{e}_{x_2} \cdot \mathbf{n} = C$

qui conduit à la relation suivante entre les composantes $V_{\lambda,1}(\lambda, x_1, b_{21})$ et $V_{\lambda,2}(\lambda, x_1, b_{21})$ de $\mathbf{V}_\lambda(\lambda, x_1, b_{21})$ (cf figure 3.6) :

$$V_{\lambda,2}(\lambda, x_1, b_{21}) = \partial_\lambda b_{21} \Big|_{x_1} + V_{\lambda,1}(\lambda, x_1, b_{21}) \partial_{x_1} b_{21} \Big|_\lambda \quad (3.2.13)$$

En étendant ce raisonnement à un domaine $D = D_1 \times D_2 \times \dots \times D_n$ de dimension $n \in \mathbb{N}$, cette contrainte sur la vitesse à la frontière se traduit par les relations suivantes : $\forall i \in \{1, \dots, n\}$, si $D_i = [a_{i1}, b_{i1}] \cup [a_{i2}, b_{i2}] \cup \dots$, on a $\forall \alpha_i \in \{a_{i1}, b_{i1}, a_{i2}, b_{i2}, \dots\}$:

$$V_{\lambda,i}\left(\lambda, x_1, \dots, x_{i-1}, \alpha_i, x_{i+1}, \dots, x_n\right) = \partial_\lambda \alpha_i + \sum_{k=1}^{i-1} V_{\lambda,k}(\lambda, x_1, \dots, x_{i-1}, \alpha_i, x_{i+1}, \dots, x_n) \partial_{x_k} \alpha_i \quad (3.2.14)$$

Ainsi, chaque composante de la vitesse $V_{\lambda,i}$ obéit, aux bornes du sous-domaine D_i , à une

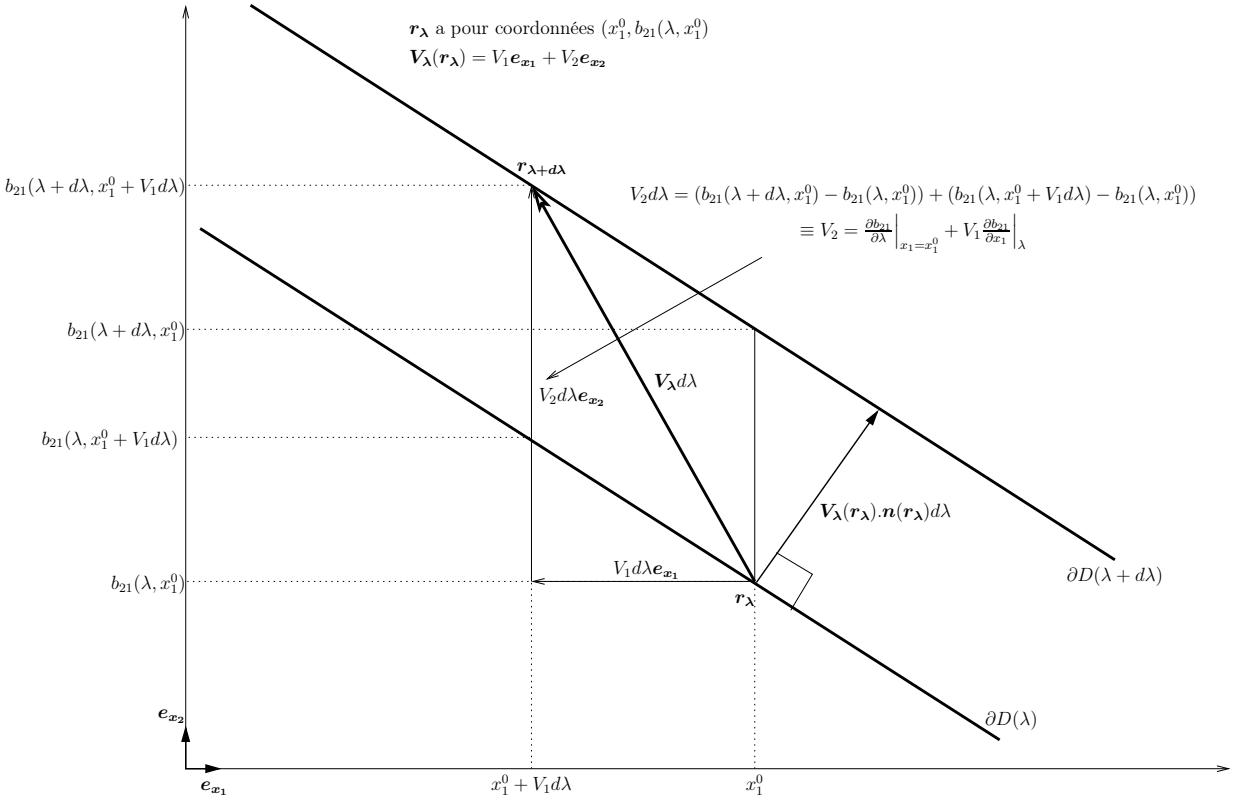


FIG. 3.6 – La contrainte sur la composante normale de la vitesse \mathbf{V}_λ à la frontière ∂D d'un domaine D équivaut lors d'une perturbation infinitésimale $d\lambda$ d'un paramètre λ à ce qu'un point \mathbf{r}_λ initialement sur la frontière du domaine ($\mathbf{r}_\lambda \in \partial D(\lambda)$) reste sur la frontière du domaine perturbé : $\mathbf{r}_{\lambda+d\lambda} \in \partial D(\lambda+d\lambda)$. Dans le cas d'un domaine bidimensionnel où $D = D_1 \times D_2$, considérons le point \mathbf{r}_λ sur la frontière de ce domaine, de coordonnées $(x_1^0, b_{21}(\lambda, x_1^0))$ dans le repère $(\mathbf{e}_{x_1}, \mathbf{e}_{x_2})$. Si on considère une perturbation $d\lambda$ de λ , l'ordonnée b_{21} (selon \mathbf{e}_{x_2}) définissant une borne du sous-domaine D_2 doit obéir à la relation suivante : $b_{21}(\lambda, x_1^0) + V_2 d\lambda = b_{21}(\lambda + d\lambda, x_1^0 + V_1 d\lambda)$ où V_1 et V_2 sont les composantes de $\mathbf{V}_\lambda(\mathbf{r}_\lambda)$ ce qui conduit à l'équation 3.2.13.

relation dépendant des autres $i - 1$ èmes composantes précédentes de \mathbf{V}_λ : $V_{\lambda,1}, V_{\lambda,2}, \dots, V_{\lambda,i-1}$. En effet, d'après l'écriture intégrale déduite de la pratique de MMC, les bornes du sous-domaine

monodimensionnel D_i ne dépendent pas des variables x_{i+1}, \dots, x_n ce qui a pour conséquence que la contrainte imposée sur $V_{\lambda,i}$ aux bornes de D_i ne dépend pas des composantes $V_{\lambda,i+1}, \dots, V_{\lambda,n}$. Ainsi, le choix de la composante $V_{\lambda,1}$ aux bornes du sous-domaine monodimensionnel D_1 n'est pas dépendante du choix des autres composantes. Le choix de la composante $V_{\lambda,2}$ aux bornes de D_2 ne dépend que du choix de $V_{\lambda,1}$, etc.

D'après cette propriété, nous proposons de construire le champ de la vitesse composante par composante en commençant par le choix de $V_{\lambda,1}$ puis de $V_{\lambda,2}$ et ainsi de suite.

On sait que $V_{\lambda,1}$ est imposé aux bornes du sous-domaine D_1 : par exemple si $D_1 = [a_{1,1}, b_{1,1}] \cup \dots \cup [a_{1,j}, b_{1,j}] \cup \dots$, $\forall j$ on a $V_{\lambda,1}(\lambda, a_{1,j}) = \partial_\lambda a_{1,j}$ et $V_{\lambda,1}(\lambda, b_{1,j}) = \partial_\lambda b_{1,j}$. Nous proposons de faire une extension linéaire de $V_{\lambda,1}$ sur l'ensemble du sous-domaine D_1 (solution du problème de Dirichlet monodimensionnel¹³) en fonction de ces contraintes aux bornes de D_1 . Ainsi, pour $x_1 \in [a_{1,j}, b_{1,j}]$, on obtient :

$$V_{\lambda,1}(x_1; \lambda) = \partial_\lambda a_{1,j} + \frac{\partial_\lambda b_{1,j} - \partial_\lambda a_{1,j}}{b_{1,j} - a_{1,j}}(x_1 - a_{1,j}) \quad (3.2.18)$$

$V_{\lambda,1}$ ne dépend alors que de x_1 et λ .

Pour déterminer chaque nouvelle composante $V_{\lambda,i}$, à partir des contraintes imposées sur $V_{\lambda,i}$ aux bornes de D_i et des expressions des composantes $V_{\lambda,1}, V_{\lambda,2}, \dots, V_{\lambda,i-1}$ (cf équation 3.2.14), on déduit $V_{\lambda,i}$ aux bornes de D_i et on effectue une extension linéaire de $V_{\lambda,i}$ sur D_i : pour $x_i \in [a_{i,j}, b_{i,j}]$, on obtient

$$V_{\lambda,i}(x_1, x_2, \dots, x_i; \lambda) = \partial_\lambda a_{i,j} + \frac{V_{\lambda,i}|_{x_i=b_{i,j}} - V_{\lambda,i}|_{x_i=a_{i,j}}}{b_{i,j} - a_{i,j}}(x_i - a_{i,j}) \quad (3.2.19)$$

où

$$\begin{aligned} V_{\lambda,i}|_{x_i=a_{i,j}} &\equiv V_{\lambda,i}(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_i = a_{i,j}; \lambda) \\ &= \partial_\lambda a_{i,j} + \sum_{k=1}^{i-1} V_{\lambda,k}(x_1, x_2, \dots, x_k; \lambda) \partial_{x_k} a_{i,j} \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

$V_{\lambda,i}$ ne dépend alors que de x_1, \dots, x_i et λ . Cette expression de \mathbf{V}_λ

$$\mathbf{V}_\lambda = \begin{pmatrix} V_{\lambda,1} \\ \vdots \\ V_{\lambda,n} \end{pmatrix} \quad (3.2.21)$$

¹³Si I est une intégrale simple de la forme

$$I = \int_{a(\lambda)}^{b(\lambda)} p_X(x; \lambda) w(x; \lambda) dx \quad (3.2.15)$$

et si on considère la sensibilité

$$\partial_\lambda I = \int_{a(\lambda)}^{b(\lambda)} p_X(x; \lambda) \left(\partial_\lambda w(x; \lambda) + w(x; \lambda) \frac{\partial_\lambda p_X(x; \lambda)}{p_X(x; \lambda)} + \frac{\partial_x [w(x; \lambda) p_X(x; \lambda) V_\lambda(x; \lambda)]}{p_X(x; \lambda)} \right) \quad (3.2.16)$$

la vitesse solution du problème de Dirichlet est une extension linéaire de la vitesse de déformation à la frontière $\{a, b\}$ ($V_\lambda(a; \lambda) = \partial_\lambda a$, $V_\lambda(b; \lambda) = \partial_\lambda b$) du domaine $[a, b]$:

$$V_\lambda(x; \lambda) = \partial_\lambda a + \frac{\partial_\lambda b - \partial_\lambda a}{b - a}(x - a) \quad (3.2.17)$$

a les avantages d'être régulière et systématique : régulière puisqu'elle se base sur n résolutions de problèmes de Dirichlet monodimensionnels et systématique puisqu'on peut la déterminer dès que l'intégrale est écrite sous la forme d'une succession d'intégrales simples (condition non restrictive dans le cadre des intégrales estimées par Monte-Carlo).

Dans la suite de ce chapitre, à travers trois exemples simples et une première application non-triviale, nous allons illustrer et tester cette méthodologie systématique de calcul simultanée de sensibilités au domaine. Nous essaierons sur chacune des illustrations de mettre en relief les difficultés correspondantes et les solutions retenues en vue d'une mise en oeuvre effective.

3.3 Tests de mise en oeuvre du calcul de sensibilité au domaine

3.3.1 Trois exemples simples de mise en oeuvre

Dans chacun des exemples développés, nous suivrons la même démarche méthodologique que l'on peut décomposer comme suit en quatre étapes :

1. Écriture sous forme intégrale de la grandeur étudiée
 2. Choix des densités de probabilités et écriture du poids de Monte-Carlo w associé au calcul de la grandeur
 3. Calcul de la vitesse de déformation du domaine
 4. Écriture du poids de Monte-Carlo w_π associé au calcul de la sensibilité au paramètre π
- Les résultats seront commentés principalement en terme de qualité de convergence et de temps de calculs.

Premier exemple : sensibilité à un paramètre spectral

Une couche monodimensionnelle d'épaisseur e , composée uniformément d'un gaz de coefficient d'absorption $k_{a\nu}$ est soumise sur une de ses faces à un rayonnement gris isotrope. On suppose que le spectre d'absorption du gaz est composé d'une seule raie ayant un profil de Lorentz :

$$k_{a\nu} = \frac{S\delta}{\pi[(\nu - \nu_c)^2 + \delta^2]}$$

où S est l'intensité de la raie, δ la demi-largeur de raie à mi-hauteur et ν_c le centre de raie. Le paramètre étudié $\Delta\nu$ est la largeur de l'intervalle spectral d'observation $\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1$, le centre $\nu_c = \frac{\nu_1 + \nu_2}{2}$ étant fixé. On s'intéresse à la puissance absorbée P_a par la couche dans l'intervalle spectral $\Delta\nu$, et à la sensibilité de cette puissance à $\Delta\nu$. C'est donc un exemple de déformation du domaine qui n'est pas géométrique.

1. Expression de P_a

$$P_a = \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu \int_{2\pi} d\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) (1 - e^{-k_{a\nu}d_0}) L \quad (3.3.1)$$

où \mathbf{n} est la normale entrante de la face soumise au rayonnement gris isotrope. $d_0 = \frac{e}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}$, $\nu_1 = \nu_c - \frac{\Delta\nu}{2}$, et $\nu_2 = \nu_c + \frac{\Delta\nu}{2}$ et L est la luminance incidente.

2. Choix des densités de probabilité et écriture du poids de Monte-Carlo associé au calcul de P_a On note p_N la densité de probabilité choisie pour générer une fréquence ν à l'intérieur de l'intervalle spectral $[\nu_1, \nu_2]$, et p_U la densité de probabilité choisie pour générer une direction incidente \mathbf{u} . Nous choisissons les densités de probabilité suivantes :

$$p_N(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu}$$

$$p_U(\mathbf{u}) = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\pi}$$

p_N correspond à une densité de probabilité uniforme sur $[\nu_1, \nu_2]$. p_U est la densité de probabilité directement déduite de la loi de Lambert (rayonnement incident isotrope). On en déduit le poids suivant :

$$w = \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})L(1 - e^{-k_{a\nu}d_0})}{p_N(\nu)p_U(\mathbf{u})} = \pi L(1 - e^{-k_{a\nu}d_0})\Delta\nu$$

3.Calcul de la vitesse de déformation du domaine $\mathbf{V}_{\Delta\nu}$ Ce vecteur a trois composantes puisque le domaine d'intégration se décompose en trois sous-domaines monodimensionnels : une dimension pour l'intervalle spectral et deux dimensions pour \mathbf{u} l'ensemble des directions incidentes possibles (\mathbf{u} est défini par son angle azimutal $\varphi \in [0, 2\pi]$ et son angle polaire $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$) :

$$D = [\nu_1, \nu_2] \times [0, 2\pi] \times [0, \frac{\pi}{2}] \quad (3.3.2)$$

On calcule donc dans un premier temps la composante $V_{\Delta\nu,1}$. D'après l'équation 3.2.18, on a :

$$V_{\Delta\nu,1}(\nu, \Delta\nu) = \partial_{\Delta\nu}\nu_1 + \frac{\partial_{\Delta\nu}\nu_2 - \partial_{\Delta\nu}\nu_1}{\nu_2 - \nu_1}(\nu - \nu_1) \quad (3.3.3)$$

or

$$\partial_{\Delta\nu}\nu_1 = -\frac{1}{2}$$

$$\partial_{\Delta\nu}\nu_2 = \frac{1}{2}$$

On obtient finalement :

$$V_{\Delta\nu,1}(\nu, \Delta\nu) = -\frac{1}{2} + \frac{\nu - \nu_1}{\Delta\nu} \quad (3.3.4)$$

Les deux sous-domaines monodimensionnels $[0, 2\pi]$ et $[0, \frac{\pi}{2}]$ étant indépendants de $\Delta\nu$ et de ν , les deux autres composantes $V_{\Delta\nu,2}$ et $V_{\Delta\nu,3}$ sont nulles. On obtient l'expression suivante de la vitesse de déformation du domaine :

$$\mathbf{V}_{\Delta\nu} = \begin{pmatrix} V_{\Delta\nu,1} = -\frac{1}{2} + \frac{\nu - \nu_1}{\Delta\nu} \\ V_{\Delta\nu,2} = 0 \\ V_{\Delta\nu,3} = 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.5)$$

4.Calcul du poids de Monte-Carlo $w_{\Delta\nu}$ associé au calcul de $\partial_{\Delta\nu}P_a$ Le poids de Monte-Carlo associé au calcul de la sensibilité de P_a à $\Delta\nu$ s'écrit¹⁴ :

$$w_{\Delta\nu} = \partial_{\Delta\nu}w + w \frac{\partial_{\Delta\nu}p_N(\nu)}{p_N(\nu)} + \left[V_{\Delta\nu,1}\partial_\nu w + w\partial_\nu V_{\Delta\nu,1} + wV_{\Delta\nu,1} \frac{\partial_\nu p_N(\nu)}{p_N(\nu)} \right] \quad (3.3.6)$$

soit après développement :

$$w_{\Delta\nu} = \left(-\frac{1}{2} + \frac{\nu - \nu_1}{\Delta\nu} \right) \left(\pi L \partial_\nu k_{a\nu} e^{-k_{a\nu} d_0} \right) + \pi L (1 - e^{-k_{a\nu} d_0}) \left(\frac{1}{\Delta\nu} \right) \quad (3.3.7)$$

où $\partial_\nu k_{a\nu} = \frac{S\delta}{\pi} \frac{-2(\nu - \nu_c)}{[(\nu - \nu_c)^2 + \delta^2]^2}$

Résultats et discussions On introduit la fraction d'énergie A absorbée par la couche $A = \frac{P_a}{\pi L \Delta\nu}$ pour adimensionnaliser les résultats. La sensibilité $\partial_{\Delta\nu}A$ est adimensionnée en la multipliant par la demi-largeur de raie à mi-hauteur. Des résultats sont présentés dans le tableau

$\frac{\delta}{\Delta\nu}$	$\frac{Se}{\pi\delta}$	\widehat{A}	$\sigma_{\widehat{A}}$	$\delta\widehat{\partial_{\Delta\nu}A}$	$\delta\sigma_{\widehat{\partial_{\Delta\nu}A}}$
0,01	1	$3,78 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-4}$	$-3,71 \cdot 10^{-4}$	$8,53 \cdot 10^{-7}$
0,1	1	0,311	$2,56 \cdot 10^{-4}$	$-2,40 \cdot 10^{-2}$	$1,36 \cdot 10^{-5}$
1	1	0,757	$1,19 \cdot 10^{-4}$	$-4,55 \cdot 10^{-2}$	$4,27 \cdot 10^{-5}$
10	1	0,780	$1,10 \cdot 10^{-4}$	$-4,94 \cdot 10^{-3}$	$4,93 \cdot 10^{-6}$
1	0,01	$1,81 \cdot 10^{-2}$	$2,01 \cdot 10^{-5}$	$-2,43 \cdot 10^{-3}$	$3,58 \cdot 10^{-6}$
1	0,1	0,157	$1,00 \cdot 10^{-4}$	$-1,90 \cdot 10^{-2}$	$1,89 \cdot 10^{-5}$
1	1	0,757	$1,19 \cdot 10^{-4}$	$-4,55 \cdot 10^{-2}$	$4,27 \cdot 10^{-5}$
1	10	0,999	$3,92 \cdot 10^{-8}$	$-4,26 \cdot 10^{-5}$	$1,12 \cdot 10^{-7}$

TAB. 3.1 – Résultats de simulations de P_a et de sa sensibilité à $\Delta\nu$. La raie est centré dans l'intervalle $\nu_c = \frac{\nu_1 + \nu_2}{2}$. Le nombre d'échantillons réalisés est $N = 10^6$.

$\frac{\delta}{\Delta\nu}$	$\frac{Se}{\pi\delta}$	$\frac{t^+}{t_0}$	$\frac{t_{std}^{5\%}}{t_0}$	$\frac{\Delta(\Delta\nu)}{\Delta\nu}$
0,01	1	1,048	$3,33 \cdot 10^3$	2,04
0,1	1	1,067	$5,67 \cdot 10^3$	2,67
1	1	1,059	$1,24 \cdot 10^4$	3,94
10	1	1,075	$7,98 \cdot 10^7$	316
1	0,01	1,075	$5,04 \cdot 10^4$	7,94
1	0,1	1,038	$4,48 \cdot 10^4$	7,48
1	1	1,059	$1,24 \cdot 10^4$	3,94
1	10	1,071	196	0,495

TAB. 3.2 – Comparaison des temps de calculs et des écart-types des estimations de sensibilités par la méthodologie de calcul simultanée par MMC et par un méthode standard de différentiation numérique.

3.1 en fonction de différentes valeurs de deux paramètres adimensionnels $\frac{\delta}{\Delta\nu}$ et $\frac{Se}{\pi\delta}$. $\frac{\delta}{\Delta\nu}$ est le

¹⁴La seule composante de vitesse non nulle étant $V_1(\nu; \Delta\nu)$, seule la composante ∂_ν de l'opérateur divergence ∇ doit être prise en compte

paramètre de forme décrivant l'importance de la raie dans l'intervalle spectral et $\frac{S_e}{\pi\delta}$ représente l'épaisseur optique au centre de la raie. L'estimation de la sensibilité de A à $\Delta\nu$ est donnée de même que les écart-types associés. On peut noter que les écart-types sur l'estimation de la sensibilité sont satisfaisants.

Dans le tableau 3.2, t^+ représente le temps de calcul de la grandeur A et de sa sensibilité à $\Delta\nu$ tandis que t_0 est le temps de calcul nécessaire au seul calcul de la grandeur A . Le rapport $\frac{t^+}{t_0}$ nous indique le coût supplémentaire en temps de calcul lié à l'estimation de la sensibilité à $\Delta\nu$. On note que ce coût est relativement faible puisqu'il représente entre 4 et 8% du temps t_0 .

Les autres colonnes de ce tableau 3.2 présentent des résultats comparatifs des temps de calcul et des incertitudes entre le calcul de par Monte-Carlo et le calcul de sensibilité standard consistant à faire tourner plusieurs fois le code en faisant varier le paramètre étudié. Dans cet exemple, le calcul standard de la sensibilité est donné par¹⁵ :

$$S_{\Delta\nu}(A) = \frac{\widehat{A}(\Delta\nu + \frac{\Delta(\Delta\nu)}{2}) - \widehat{A}(\Delta\nu - \frac{\Delta(\Delta\nu)}{2})}{\Delta(\Delta\nu)} \quad (3.3.8)$$

Deux calculs de $\widehat{A}(\Delta\nu + \frac{\Delta(\Delta\nu)}{2})$ et de $\widehat{A}(\Delta\nu - \frac{\Delta(\Delta\nu)}{2})$ sont donc nécessaires. Dans le tableau 3.2, $t_{\text{std}}^{5\%}$ représente le temps CPU nécessaire pour effectuer un calcul standard de $S_{\Delta\nu}(A)$ ayant la même incertitude que l'estimateur $\widehat{\partial_{\Delta\nu} A}$ et en prenant $\Delta(\Delta\nu) = \frac{5}{100}\Delta\nu$. Cette incertitude sur l'estimation de $S_{\Delta\nu}(A)$ est déduite de l'incertitude associé à l'estimation de A : l'écart-type sur le calcul standard de la sensibilité est égal à

$$\sigma_{S_{\Delta\nu}(A)} = \frac{\sqrt{\sigma_{\widehat{A}(\Delta\nu + \frac{5}{100}\frac{\Delta\nu}{2})}^2 + \sigma_{\widehat{A}(\Delta\nu - \frac{5}{100}\frac{\Delta\nu}{2})}^2}}{\Delta(\Delta\nu)} \quad (3.3.9)$$

Si on suppose les variances $\sigma_{\widehat{A}(\Delta\nu + \frac{5}{100}\frac{\Delta\nu}{2})}^2$ et $\sigma_{\widehat{A}(\Delta\nu - \frac{5}{100}\frac{\Delta\nu}{2})}^2$ du même ordre de grandeur que $\sigma_{\widehat{A}(\Delta\nu)}^2$, on obtient l'écart-type suivant sur l'estimation de la sensibilité $S_{\Delta\nu}(A)$:

$$\sigma_{S_{\Delta\nu}(A)} \simeq \frac{\sqrt{2}\sigma_{\widehat{A}(\Delta\nu)}}{\Delta(\Delta\nu)} \quad (3.3.10)$$

L'écart-type est proportionnel à l'inverse de la racine du nombre d'échantillons réalisés pour calculer \widehat{A} . Le nombre d'échantillons M nécessaire au calcul de \widehat{A} dont on déduit une estimation de $S_{\Delta\nu}(A)$ avec un écart-type du même ordre de grandeur que $\widehat{\sigma_{\partial_{\Delta\nu} A}}$ doit satisfaire la relation :

$$\frac{\sigma_{S_{\Delta\nu}(A)}^2}{2M} \simeq \frac{\widehat{\sigma_{\partial_{\Delta\nu} A}}^2}{N} \quad (3.3.11)$$

Le facteur 2 dans le dénominateur $2M$ est dû au fait que deux calculs sont nécessaires pour obtenir $S_{\Delta\nu}(A)$. Si on suppose que les temps de calcul sont proportionnels au nombre d'échantillons réalisés, on a

$$\frac{t_{\text{std}}^{5\%}}{t_0} \simeq \frac{2M}{N} \quad (3.3.12)$$

¹⁵Pour raison de clarté, nous noterons la sensibilité calculée par la méthode standard $S_{\Delta\nu}(A)$ tandis que nous continuons de noter la sensibilité calculée par la méthodologie basée sur Monte-Carlo $\widehat{\partial_{\Delta\nu} A}$. Il en est de même pour les écart-types notés respectivement $\sigma_{S_{\Delta\nu}(A)}$ et $\widehat{\sigma_{\partial_{\Delta\nu} A}}$

Le rapport $\frac{t_{\text{std}}^{5\%}}{t_0}$ peut alors être estimé par :

$$\frac{t_{\text{std}}^{5\%}}{t_0} \simeq \frac{\sigma_{S_{\Delta\nu}(A)}^2}{\widehat{\sigma_{\partial_{\Delta\nu} A}^2}} = \frac{4\sigma_A^2}{[\Delta(\Delta\nu)]^2 \widehat{\sigma_{\partial_{\Delta\nu} A}^2}} \quad (3.3.13)$$

Les résultats sont significatifs (cf tableau 3.2) puisque le rapport $\frac{t_{\text{std}}^{5\%}}{t_0}$ est nettement supérieur au rapport $\frac{t_+}{t_0}$ démontrant sur cet exemple l'efficacité du calcul simultané de sensibilité par Monte-Carlo. Ceci est d'autant plus vrai que l'écart de 5% n'est pas exagérément petit au regard du calcul d'une dérivée linéaire.

Dans cet esprit, la dernière colonne du tableau 3.2 présente le rapport $\frac{\Delta(\Delta\nu)}{\Delta\nu}$ nécessaire pour obtenir la même incertitude sur $S_{\Delta\nu}(A)$ que sur $\widehat{\partial_{\Delta\nu} A}$ avec un temps de calcul uniquement multiplié par 2. Pour obtenir une incertitude convenable avec la méthode standard, les deux paramètres possibles à ajuster sont soit le temps de calcul, à travers le choix du nombre d'échantillons à réaliser, soit la variation $\Delta(\Delta\nu)$ du paramètre $\Delta\nu$. D'après 3.3.10, on déduit que pour avoir $\sigma_{S_{\Delta\nu}(A)} \simeq \sigma_{\partial_{\Delta\nu} A}$,

$$\Delta(\Delta\nu) \simeq \frac{\sqrt{2}\sigma_A}{\sigma_{\partial_\lambda A}} \quad (3.3.14)$$

Les résultats sont aussi très significatifs puisque le rapport est généralement supérieur à 1 indiquant des variations du paramètre supérieures à 100% (50% dans le meilleur des cas). Ces plages de variations sont largement supérieures à celles communément utilisées en différentiation numérique où il importe de rester dans une plage de quasi-linéarité de la grandeur en fonction du paramètre étudié.

Deuxième exemple : Calcul de la sensibilité d'un facteur de forme F_{12} entre deux surfaces S_1 et S_2 à un déplacement d'une des deux surfaces

Nous présentons maintenant deux exemples triviaux concernant des calculs de sensibilités de facteur de forme. Ces exemples nous ont permis de tester plusieurs vitesses de déformation choisies arbitrairement et de confirmer ainsi que la valeur de la sensibilité est indépendante (dans le cadre des contraintes décrites précédemment au paragraphe 3.2.1) du choix de la vitesse.

On considère deux surfaces parallèles S_1 et S_2 d'aires respectives A_1 et A_2 (configuration identique à celle de l'exemple traité dans 3.1.3). Les notations que nous utilisons au cours des tests effectués sur le calcul de F_{12} sont détaillées dans la figure 3.7. Nous nous intéressons à la sensibilité de F_{12} à un déplacement de la surface S_2 suivant l'axe des x . Ce déplacement est décrit par une perturbation du paramètre α (voir figure 3.7).

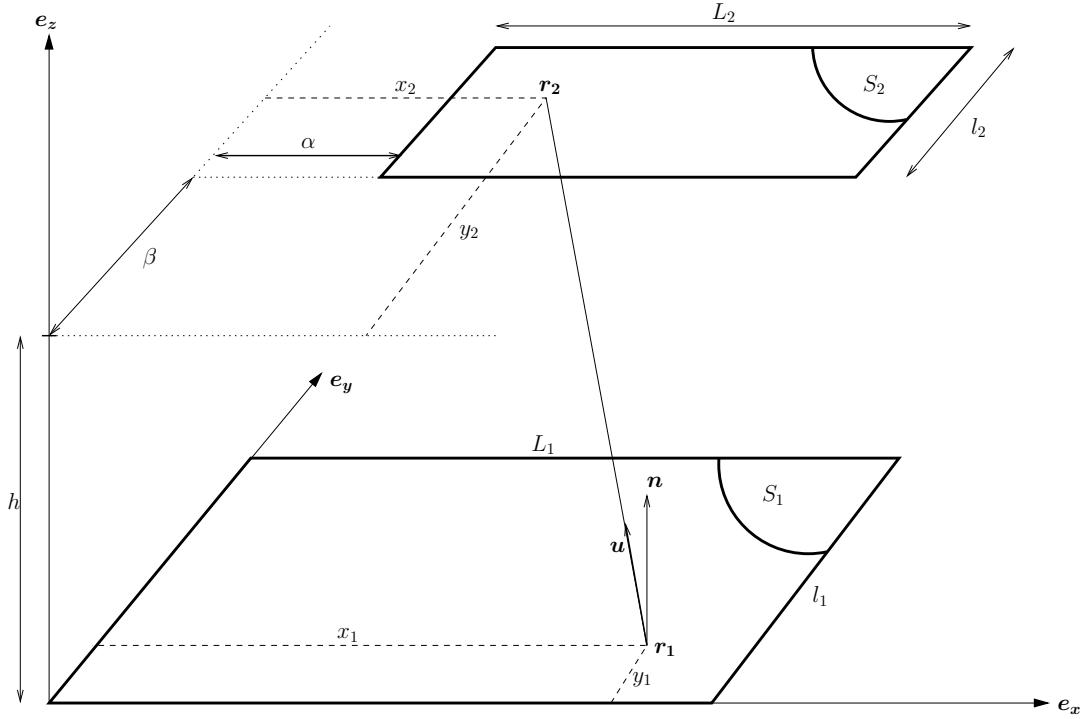


FIG. 3.7 – Facteur de forme entre deux surfaces parallèles, L_1 et l_1 sont la longueur et la largeur de la surface S_1 . L_2 et l_2 sont la longueur et la largeur de la surface S_2 . α et β décrivent respectivement l'écart entre la surface S_2 et les axes e_x et e_y . x_1 et y_1 sont les coordonnées du point r_1 dans le repère $(0, e_x, e_y)$. x_2 et y_2 sont les coordonnées du point r_2 .

1. Expression de F_{12} Nous reprenons l'expression suivante introduite dans le paragraphe 3.1.3 puis développée comme une succession d'intégrale simple¹⁶ :

$$\begin{aligned}
 F_{12} &= \int_{S_1} d\mathbf{r}_1 \int_{S_2} d\mathbf{r}_2 \frac{1}{A_1 \pi} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})^2}{||\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1||^2} \\
 &= \int_0^{L_1} dx_1 \int_0^{l_1} dy_1 \int_{\alpha}^{\alpha+L_2} dx_2 \int_{\beta}^{\beta+l_2} dy_2 \frac{1}{A_1} \frac{h^2}{\pi \left((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + h^2 \right)^2}
 \end{aligned} \tag{3.3.15}$$

¹⁶Au cours du développement, nous avons utilisé les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
 A_1 &= L_1 \times l_1 \\
 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) &= \frac{h}{||\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1||} \\
 ||\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|| &= \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + h^2}
 \end{aligned}$$

2.Choix des densités de probabilités et écriture du poids w Les densités de probabilités choisies pour estimer F_{12} sont uniformes :

$$\begin{aligned} p_{X_1} &= \frac{1}{L_1}; \quad p_{Y_1} = \frac{1}{l_1} \\ p_{X_2} &= \frac{1}{L_2}; \quad p_{Y_2} = \frac{1}{l_2} \end{aligned} \quad (3.3.16)$$

On en déduit le poids de Monte-Carlo associé au calcul de F_{12} :

$$w(x_1, y_1, x_2, y_2) = L_2 \times l_2 \frac{h^2}{\pi \left((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + h^2 \right)^2} \quad (3.3.17)$$

3.Calcul de la vitesse de déformation du domaine \mathbf{V}_α Le domaine d'intégration D est de dimension 4 :

$$D = [0, L_1] \times [0, l_1] \times [\alpha, \alpha + L_2] \times [\beta, \beta + l_2] \quad (3.3.18)$$

La vitesse de déformation a donc quatre composantes. Seul le sous-domaine $[\alpha, \alpha + L_2]$ est fonction du paramètre α . De plus, le sous-domaine $[0, l_1]$ n'est pas dépendant de x_1 ; le sous-domaine $[\alpha, \alpha + L_2]$ n'est pas dépendant de x_1 et de y_1 ; le sous-domaine $[\beta, \beta + l_2]$ n'est pas dépendant de x_1 , y_1 et de x_2 . Selon l'équation 3.2.19, la vitesse de déformation \mathbf{V}_α peut alors s'écrire :

$$\mathbf{V}_\alpha = \begin{pmatrix} V_{\alpha,1} = 0 \\ V_{\alpha,2} = 0 \\ V_{\alpha,3} = \partial_\alpha \alpha + \frac{\partial_\alpha(\alpha+L_2) - \partial_\alpha \alpha}{\alpha+L_2-\alpha} (x_2 - \alpha) = 1 \\ V_{\alpha,4} = 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.19)$$

Cette vitesse \mathbf{V}_α sera notée dorénavant \mathbf{V}_α^a ¹⁷.

4.Calcul du poids de Monte-Carlo w_α Le poids w associé au calcul de F_{12} et les quatre densités de probabilité ne dépendent pas de α . On trouve ainsi l'expression suivante de w_α^a :

$$w_\alpha^a = \frac{\nabla w p_{X_1} p_{Y_1} p_{X_2} p_{Y_2} \mathbf{V}_\alpha^a}{p_{X_1} p_{Y_1} p_{X_2} p_{Y_2}} \quad (3.3.20)$$

soit après calcul :

$$w_\alpha^a = L_2 \times l_2 \frac{h^2 \times 4(x_2 - x_1)}{\pi \left((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + h^2 \right)^3} \quad (3.3.21)$$

Résultats et discussion La courbe 3.8 est un exemple de calcul simultané de F_{12} et de sa sensibilité à α . On observe sur les barres d'erreurs une aussi bonne convergence du calcul de sensibilité que du calcul du facteur de forme lui-même.

¹⁷Nous utilisons une notation particulière du fait que nous donnerons par la suite d'autres expressions possibles de la vitesse

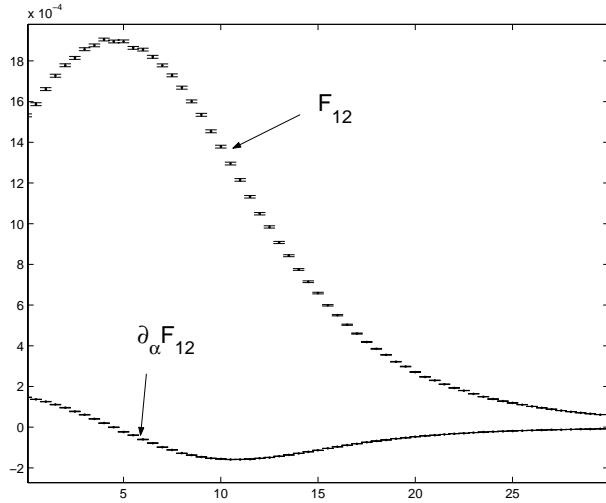


FIG. 3.8 – Estimations de F_{12} et $\partial_\alpha F_{12}$ en fonction de α . Les incertitudes statistiques sont données sous la forme de barres d'erreurs. Le nombre d'échantillons effectués par calcul est $N = 10^4$. $L_1 = l_1 = 10$, $L_2 = l_2 = 1$, $\beta = 0$ (les valeurs de ces paramètres restent identiques pour les tests qui suivent)

Nous avons profité de cet exemple pour tester d'autres vitesses de déformation \mathbf{V}_α choisies de la façon suivante : nous avons conservé strictement la même vitesse à la frontière du domaine et les mêmes composantes de la vitesses $V_{\alpha,1}$, $V_{\alpha,2}$ et $V_{\alpha,4}$ (toujours nulles). Nous avons par contre changé l'extension¹⁸ de la composante de la vitesse $V_{\alpha,3}$ dans le sous-domaine $[\alpha, \alpha + L_2]$ ¹⁹.

Nous avons testé une extension de $V_{\alpha,3}$ de type gaussienne sur $[\alpha, \alpha + L_2]$ (que nous notons $V_{\alpha,3}^b$) :

$$V_{\alpha,3}^b = \exp\left(-\frac{L_2^2}{4}\right) \exp\left(-(x_2 - \alpha - \frac{L_2}{2})^2\right) \quad (3.3.22)$$

Nous avons aussi testé une extension de $V_{\alpha,3}$ de type sinusoïdale sur $[\alpha, \alpha + L_2]$ (que nous notons $V_{\alpha,3}^c$)

$$V_{\alpha,3}^c = \cos\left(2\pi\frac{x_2 - \alpha}{L_2}\right) \quad (3.3.23)$$

Les trois extensions utilisées de $V_{\alpha,3}$ sur $[\alpha, \alpha + L_2]$ sont tracé sur la figure 3.9.

Sur la figure 3.10, sont tracées des valeurs des estimations $\widehat{\partial_\alpha F_{12}}$ calculées avec les trois vitesses \mathbf{V}_α^a , \mathbf{V}_α^b et \mathbf{V}_α^c . On observe bien que les estimations obtenues avec ces trois vitesses sont les mêmes. Seuls diffèrent les écart-types associés aux résultats, que nous comparons sur la figure 3.11. L'expression proposée au paragraphe 3.2.2, basée sur une extension linéaire de la vitesse à la frontière de chaque sous-domaine monodimensionnel, donne les écart-types les plus faibles et confirme ainsi le fait que notre proposition, de par sa régularité, n'introduit

¹⁸cf paragraphe 3.2.2

¹⁹Ceci se traduit par un changement de la vitesse entre les points de coordonnées (x_1, y_1, α, y_2) et les points de coordonnées $(x_1, y_1, \alpha + L_2, y_2)$. Auparavant la vitesse était constante et orienté selon l'axe des x_2 . Avec ces nouvelles vitesses, elle reste parallèle à l'axe des x_2 mais n'est plus constante

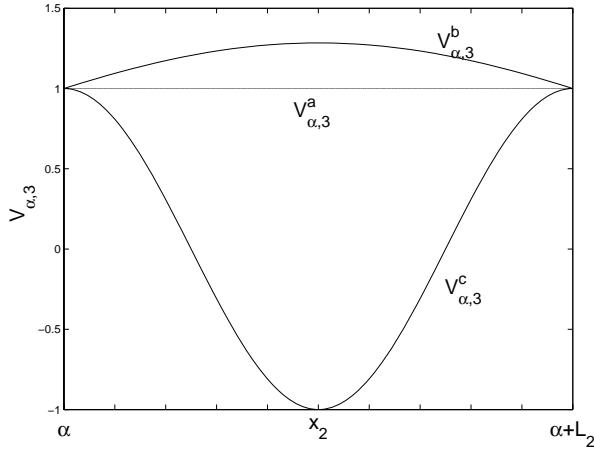


FIG. 3.9 – Tracé des trois composantes testées $V_{\alpha,3}^a, V_{\alpha,3}^b$ et $V_{\alpha,3}^c$ de la vitesse de déformation du domaine \mathbf{V}_{α}

pas de source de variance supplémentaire sur les estimations des sensibilités. Des extensions plus irrégulières de type gaussienne ou sinusoïdale sont à l'origine dans cet exemple d'une augmentation significative des écart-types.

Troisième exemple : Calcul de la sensibilité d'un facteur de forme F_{12} entre deux surfaces S_1 et S_2 à une déformation d'une des deux surfaces

On considère maintenant une déformation de la surface S_2 lié à une perturbation de la longueur L_2 (cf figure 3.7).

1. Expression de F_{12} On reprend la même expression que lors de l'exemple précédent (cf équation 3.3.15).

2. Choix des densités de probabilités et écriture du poids w Les densités de probabilités choisies pour estimer F_{12} sont les mêmes que précédemment de même que le poids de Monte-Carlo w (cf équations 3.3.16 et 3.3.17) :

3. Calcul de la vitesse de déformation du domaine \mathbf{V}_{L_2} Comme précédemment seul le sous-domaine $[\alpha, \alpha + L_2]$ du domaine $D = [0, L_1] \times [0, l_1] \times [\alpha, \alpha + L_2] \times [\beta, \beta + l_2]$ est dépendant du paramètre L_2 et puisque ces sous-domaines ne dépendent pas des variables d'intégration, seule la troisième composante du vecteur vitesse n'est pas nulle. On obtient :

$$\mathbf{V}_{L_2} = \begin{pmatrix} V_{L_2,1} = 0 \\ V_{L_2,2} = 0 \\ V_{L_2,3}(x_2) = \partial_{L_2}\alpha + \frac{\partial_{L_2}(\alpha+L_2) - \partial_{L_2}\alpha}{\alpha+L_2-\alpha}(x_2 - \alpha) = \frac{x_2 - \alpha}{L_2} \\ V_{L_2,4} = 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.24)$$

Cette vitesse sera notée dans la suite $\mathbf{V}_{L_2}^a$.

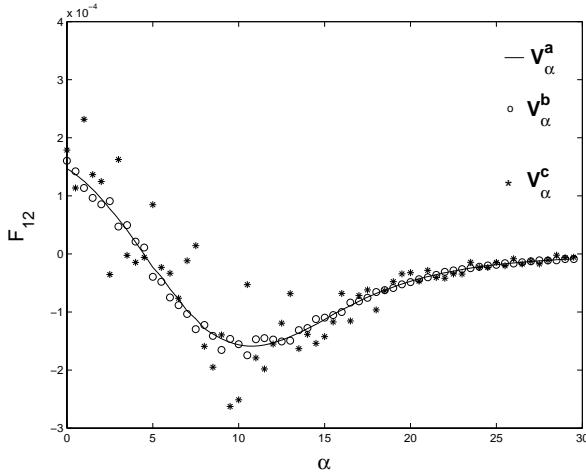


FIG. 3.10 – Comparaison des estimations de $\partial_\alpha F_{12}$ calculées avec les trois différentes vitesses V_α^a , V_α^b et V_α^c .

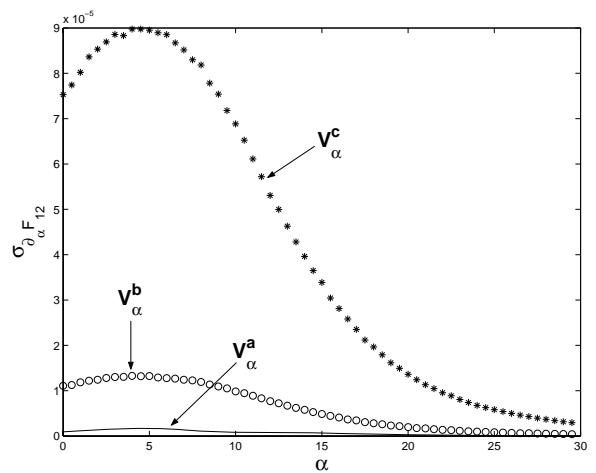


FIG. 3.11 – Comparaison des écart-types $\sigma_{\widehat{\partial_\alpha F_{12}}}$ calculés avec les trois différentes vitesses V_α^a , V_α^b et V_α^c .

4.Calcul du poids de Monte-Carlo w_{L_2} Ce poids s'écrit :

$$w_{L_2}^a = \partial_{L_2} w + w \frac{\partial_{L_2} p_{X_2}}{p_{X_2}} + \partial_{x_2}(wV_{L_2,3}) \quad (3.3.25)$$

soit après calcul :

$$w_{L_2}^a = L_2 \times l_2 \frac{h^2 \times 4(x_2 - x_1)}{\pi \left((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + h^2 \right)^3} \frac{x_2 - \alpha}{L_2} + \frac{w}{L_2} \quad (3.3.26)$$

Résultats et discussions Les résultats retranscrits sur la courbe 3.12 montrent que les barres d'erreur sur le calcul de la sensibilité sont satisfaisantes. Comme dans l'exemple précédent, nous avons à nouveau comparé les calculs pour différentes vitesses de déformation. Sur le même principe que dans l'exemple précédent, nous avons conservé les trois composantes $V_{L_2,1}$, $V_{L_2,2}$ et $V_{L_2,4}$ (qui sont nulles) et la vitesse de déformation à la frontière de D ; nous avons alors fait varier (arbitrairement) l'extension entre $V_{L_2,3}(\alpha) = 0$ et $V_{L_2,3}(\alpha + L_2) = 1$ de la composante $V_{L_2,3}$. Les extensions suivantes ont été testées :

$$\begin{aligned} V_{L_2;3}^b &= \frac{(x_2 - \alpha)^2}{L_2^2} \\ V_{L_2;3}^c &= \frac{(x_2 - \alpha)^3}{L_2^3} \\ V_{L_2;3}^d &= \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{x_2 - \alpha}{L_2} \right) \end{aligned} \quad (3.3.27)$$

Ces quatre extensions de $V_{L_2,3}$ sont tracées sur la figure 3.13.

La figure 3.14 présente les estimations de $\partial_{L_2} F_{12}$ obtenues avec les quatre vitesses. On observe à nouveau que ces estimations sont les mêmes aux erreurs statistiques près. Sur la figure 3.15, sont tracés les écart-types obtenus avec ces quatre vitesses. On observe alors que $V_{L_2}^a$, $V_{L_2}^b$

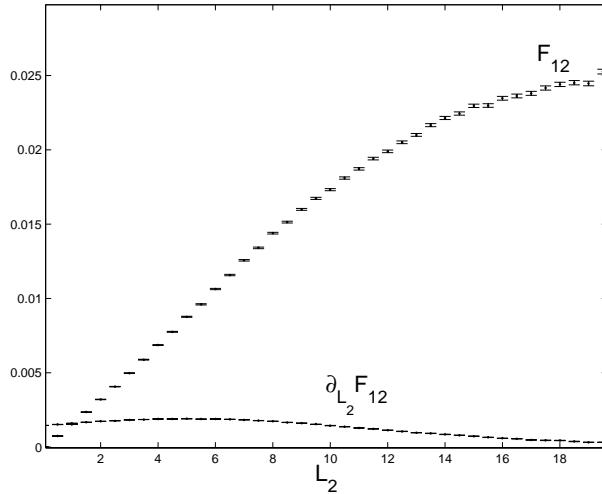


FIG. 3.12 – Estimations de F_{12} et $\partial_{L_2} F_{12}$ en fonction de L_2 . Les incertitudes statistiques sont données sous la forme de barres d'erreurs. Le nombre d'échantillons effectués par calcul est $N = 10^4$. $L_1 = l_1 = 10$, $l_2 = 1$, $\alpha = \beta = 0$ (les valeurs de ces paramètres restent identiques pour les tests qui suivent lors de cet exemple)

puis $V_{L_2}^c$ donnent tour à tour (au fur et à mesure que L_2 augmente) les écart-types les plus faibles. Ceci confirme le fait que la vitesse de déformation que nous proposons au paragraphe 3.2.2 n'est pas forcément la meilleure vitesse en terme de convergence. Cependant, les ordres de grandeurs des écart-types des estimations faites avec cette vitesse restent satisfaisants pour n'importe quelle configuration paramétrique. Cette régularité dans les résultats associées à sa simplicité de mise en oeuvre en font une solution efficace. Ces résultats mettent notamment en relief une des perspectives que nous retiendrons en conclusion de cette étude : la possibilité de rechercher de techniques permettant de déterminer une vitesse de déformation optimale en terme de convergence.

Notre objectif principal dans la suite de ce manuscrit a été de tester la méthodologie de calcul simultanée de sensibilité sur des applications plus complexes de façon à faire émerger au maximum les difficultés et contraintes associés à la méthodologie. .

3.3.2 Travaux de formulation pour une application non triviale : la diffusion multiple

Au cours de cet exemple, nous allons considérer une couche monodimensionnelle d'épaisseur e soumise sur une de ses faces à un rayonnement monochromatique isotrope. Cette couche est composée d'un milieu absorbant (de coefficient d'absorption k_a homogène) et diffusant (de coefficient de diffusion k_d homogène). Nous allons estimer la fraction d'énergie absorbée par cette couche (P_a est la puissance radiative absorbée par la couche et L la luminance incidente) :

$$A = \frac{P_a}{\pi L} \quad (3.3.28)$$

ainsi que la sensibilité $\partial_e A$ de A à l'épaisseur de la couche e .

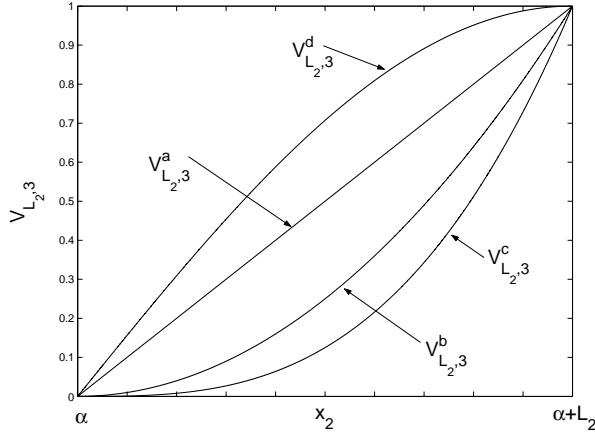


FIG. 3.13 – Tracé des quatre extensions $V_{L_2,3}^a$, $V_{L_2,3}^b$, $V_{L_2,3}^c$ et $V_{L_2,3}^d$ de la composante $V_{L_2,3}$ de la vitesse de déformation du domaine \mathbf{V}_{L_2}

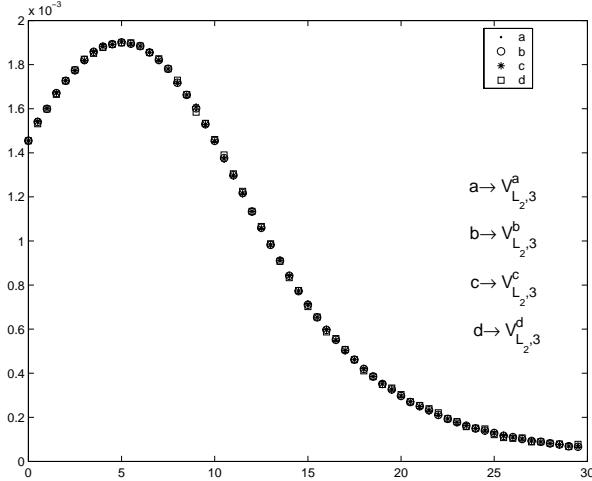


FIG. 3.14 – Comparaison des estimations de $\partial_{L_2} F_{12}$ calculées avec les quatre différentes vitesses $\mathbf{V}_{L_2}^a$, $\mathbf{V}_{L_2}^b$, $\mathbf{V}_{L_2}^c$ et $\mathbf{V}_{L_2}^d$.

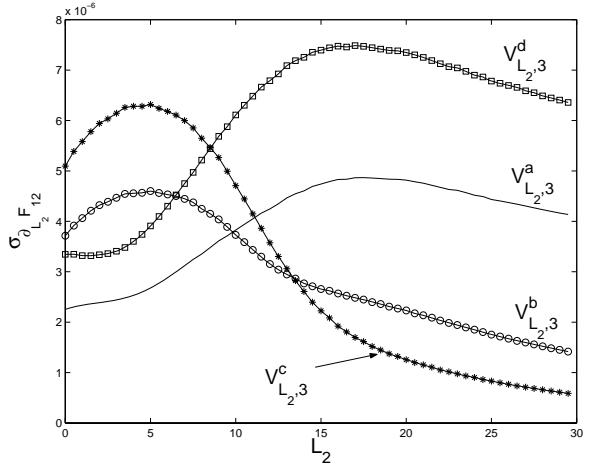
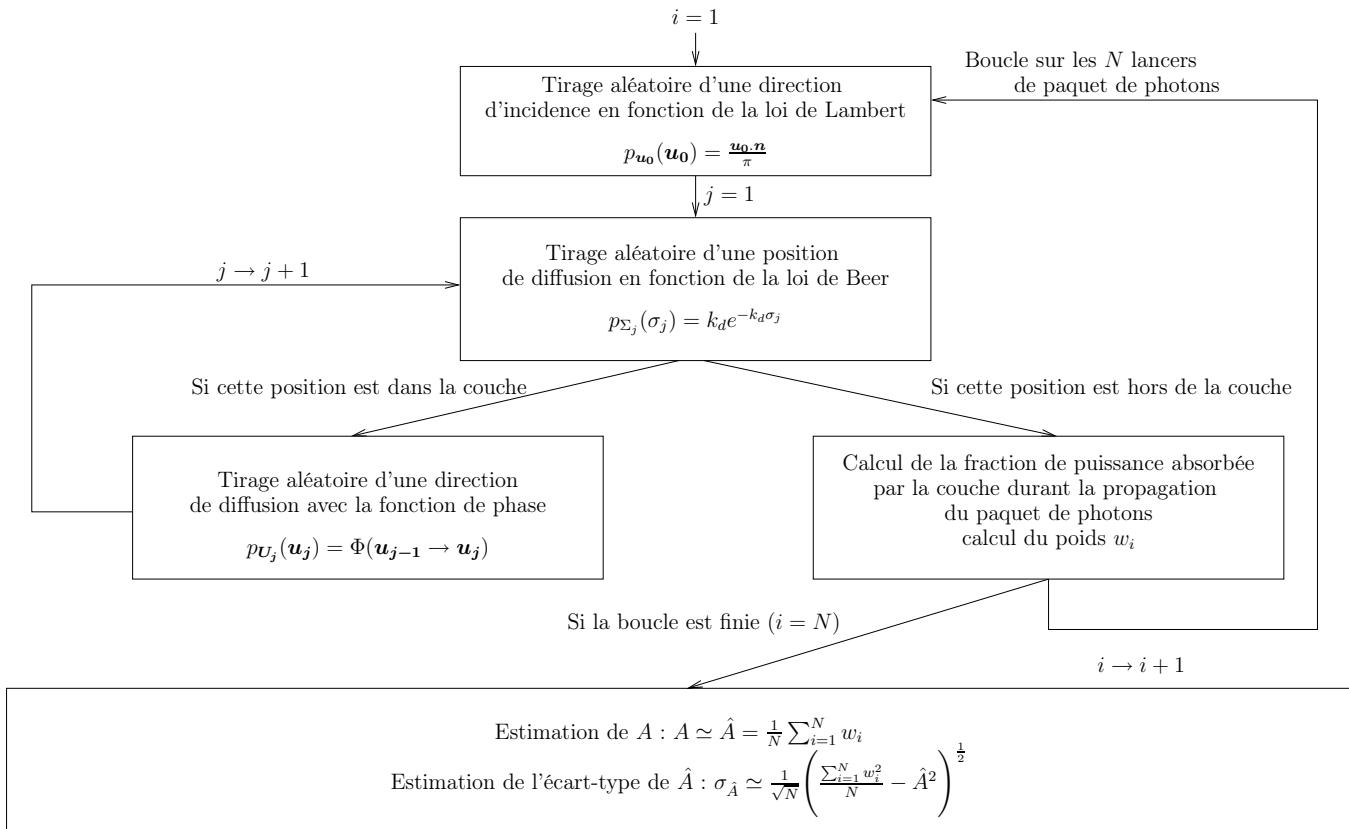


FIG. 3.15 – Comparaison des écart-types $\sigma_{\partial_{L_2} F_{12}}$ calculés avec les quatre différentes vitesses $\mathbf{V}_{L_2}^a$, $\mathbf{V}_{L_2}^b$, $\mathbf{V}_{L_2}^c$ et $\mathbf{V}_{L_2}^d$.

Il faut noter que malgré le côté académique de l'illustration, la complexité algorithmique est tout à fait générale et typique de ce genre de problèmes. La prise en compte des phénomènes de diffusion multiple va se traduire d'un point de vue formel par des expressions intégrales de A et $\partial_e A$ sur un domaine d'intégration de dimension infinie. Le traitement de ce type d'intégrales va faire émerger des difficultés de mise en oeuvre de la méthodologie d'estimation simultanée de sensibilités pour lesquelles nous proposons une solution effective et générale.

Au cours de cet exemple, nous nous plaçons dans l'optique d'ajouter le calcul de la sensibilité $\partial_e A$ à un code de calcul de A déjà existant et tout à fait standard :

Algorithme de calcul de A Cet algorithme, analogue, est décrit sur la figure 3.16. Il consiste à simuler les trajets optiques de N paquets de photons en fonction des phénomènes de diffusions (tirage aléatoire d'une direction d'incidence, d'une position de diffusion puis d'une direction de

FIG. 3.16 – Algorithme de Monte-Carlo analogue utilisé pour calculer A

diffusion, etc., jusqu'à la sortie de la couche). L'estimateur \hat{A} est alors égal à la valeur moyenne de la fraction de puissance (le long du chemin de chaque paquet de photons) absorbée par la couche. Les densités de probabilité choisies sont la loi de Lambert (rayonnement incident isotrope) pour le tirage aléatoire d'une direction d'incidence dans la couche, la loi de Beer pour le tirage d'une position de diffusion et la fonction de phase pour le tirage d'une direction de diffusion.

Nous avons vu dans le chapitre précédent qu'un algorithme analogue ne nécessite pas le développement de la formulation intégrale correspondante. Cependant, pour estimer des sensibilités, nous sommes contraints dans un premier temps d'effectuer cet exercice de formulation en appliquant la démarche proposée au paragraphe 2.2.3 du chapitre précédent.

Au cours de cet exercice de formulation, les conditions algorithmiques du type – si le paquet de photons sort de la couche alors ... ; s'il reste dans la couche alors ... – se traduisent par l'introduction de fonctions heaviside dans l'écriture intégrale de A . Écrivons d'ores et déjà la formulation de A déduite de l'algorithme et que nous expliciterons plus précisément ultérieurement.

ment²⁰ :

$$\begin{aligned} A = & \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + \right. \\ & H(d_0 - \sigma_1) \int_{4\pi} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \left\{ H(\sigma_2 - d_1)(1 - e^{-k_a (\sigma_1 + d_1)}) + \right. \\ & \left. \left. H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3.3.29)$$

σ_1 et σ_2 représentent respectivement les abscisses curvilignes de la première et de la seconde position de diffusion ; d_0 est la distance que doit parcourir le paquet de photons pour sortir de la couche sans diffusion ; d_1 est la distance, à partir de la première position de diffusion, que doit parcourir le paquet de photons pour sortir de la couche après une diffusion. Cette expression 3.3.29 de A peut s'écrire sous la forme²¹ :

$$A = \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} d\sigma_1 \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} d\sigma_2 \dots f(\mathbf{u}_0, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots) \quad (3.3.30)$$

où f est égale à

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}_0, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots) = & \left(p_{U_0}(\mathbf{u}_0) p_{\Sigma_1}(\sigma_1) p_{U_1} \dots \right) \times \\ & H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + H(d_0 - \sigma_1) \left\{ H(\sigma_2 - d_1)(1 - e^{-k_a (\sigma_1 + d_1)}) \right. \\ & \left. + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \end{aligned}$$

ou $p_{U_0}(\mathbf{u}_0), p_{\Sigma_1}(\sigma_1), p_{U_1}(\mathbf{u}_1), \dots$ sont des densités de probabilité de tirage²². A l'aide du formalisme de Dirac, on peut dériver ces fonctions heaviside : par exemple $\forall i \in \mathbb{N}$, on a

$$\partial_e H(\sigma_i - d_{i-1}) = -\partial_e d_{i-1} \delta(\sigma_i - d_{i-1}) \quad (3.3.31)$$

où δ est la fonction Dirac. En utilisant des relations du même type que celle de l'équation 3.3.31, la fonction f peut être dérivée mais comme nous l'avons vu dans le paragraphe 3.1.3, ceci ne peut pas être appliqué car l'utilisation d'une fonction Dirac implique un changement du domaine d'intégration. Ce type de développement nous ramènerait à la somme d'une intégrale sur le domaine d'intégration et d'une intégrale sur la frontière de ce domaine. Or pour estimer simultanément $\partial_e A$ et A , nous devons utiliser le même algorithme et donc écrire sous forme intégrale l'expression de la sensibilité dans une formulation adaptée à cet algorithme, c'est-à-dire en gardant le même domaine d'intégration, les mêmes densités de probabilités et les mêmes fonctions heavisides (car ces fonctions décrivent les conditions algorithmiques). Dans cet objectif, nous proposons alors une démarche générale pour calculer des sensibilités par Monte-Carlo qui peut se décomposer en 5 points :

– 1. Développement de la formulation intégrale de la grandeur associée à l'algorithme utilisé (si

²⁰Dans le point 1. appelé “Développement de la formulation intégrale de A associée à l'algorithme de MMC utilisé” de la démarche méthodologique proposée par la suite

²¹Voir le paragraphe 2.2.2 du chapitre précédent où ce type de réécriture est expliqué

²²Nous donnerons ultérieurement l'expression de ces densités de probabilités

cette formulation n'est pas déjà explicitée) ; écriture des densités de probabilités et du poids de Monte-Carlo w associée au calcul de la grandeur

- 2. Travaux de reformulation permettant d'écrire une expression de la grandeur sous une forme adaptée au calcul de la dérivée (en évitant l'introduction de fonction Dirac).
- 3. Calcul de la vitesse de déformation du domaine et expression de la sensibilité
- 4. Reformulation en une expression de la sensibilité adaptée à l'algorithme de MMC initial²³
- 5. Écriture du poids de Monte-Carlo associé à l'estimation de la sensibilité

1. Développement de la formulation intégrale de A associée à l'algorithme de MMC utilisé ; écriture des densités de probabilités et du poids de Monte-Carlo w associé au calcul de A Commençons par écrire les densités de probabilités choisies sont la loi de Lambert, la loi de Beer et la fonction de phase :

$$\begin{aligned} p_{\Sigma_i}(\sigma_i) &= k_d e^{-k_d \sigma_i} \text{ pour } i \in \mathbb{N}^{*+} \\ p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) &= \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \\ p_{\mathbf{U}_i}(\mathbf{u}_i) &= \Phi(\sigma_i, \mathbf{u} \rightarrow \mathbf{u}_i) \text{ pour } i \in \mathbb{N}^{*+} \end{aligned}$$

Sur la figure 3.17 sont représentées sur un chemin optique les notations que nous allons utiliser. Pour développer la formulation de A associée à l'algorithme de MMC présenté sur la figure 3.16, nous allons appliquer à nouveau la procédure décrite dans le paragraphe 2.2.3 du chapitre précédent. Cette procédure consiste à empiler, en fonction de l'algorithme, les intégrales au fur et à mesure que l'on génère aléatoirement des réalisations de variables aléatoires. Les bornes d'intégration d'une intégrale se déduisent de l'ensemble des valeurs possibles de la variable aléatoire considérée.

L'algorithme utilisé pour estimer A commence par le tirage aléatoire d'une direction \mathbf{u}_0 qui se traduit par une intégrale sur les 2π d'angle solide (\mathbf{n} est la normale entrante) :

$$A = \int_{2\pi} \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} d\mathbf{u}_0 \dots$$

Il vient ensuite le tirage aléatoire d'une première position de diffusion définie par σ_1 sur \mathbb{R}^+ . σ_1 est l'abscisse curviline ayant comme origine le point d'émission $\mathbf{r}_0(x_0, y_0, z_0)$ et définie par la direction d'émission \mathbf{u}_0 . On empile alors l'intégrale suivante sur l'expression de A :

$$A = \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \dots$$

Ensuite, l'algorithme varie si la première position de diffusion $\mathbf{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ définie²⁴ par σ_1 est à l'intérieur ou à l'extérieur de la couche : on introduit alors la distance $d_0 = \frac{e}{\cos \theta_0}$ qui est la

²³S'il n'y a pas de problème posé par le calcul de la dérivée, les points 2. et 4. deviennent inutiles.

²⁴Les coordonnées x_1 , y_1 et z_1 sont égales à (voir figure 3.17)

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + \sigma_1 \sin \varphi_0 \sin \theta_0 \\ y_1 &= y_0 + \sigma_1 \cos \varphi_0 \sin \theta_0 \\ z_1 &= z_0 + \sigma_1 \cos \theta_0 \end{aligned} \tag{3.3.32}$$

où φ_0 et θ_0 sont les angles azimutal et polaire définissant \mathbf{u}_0

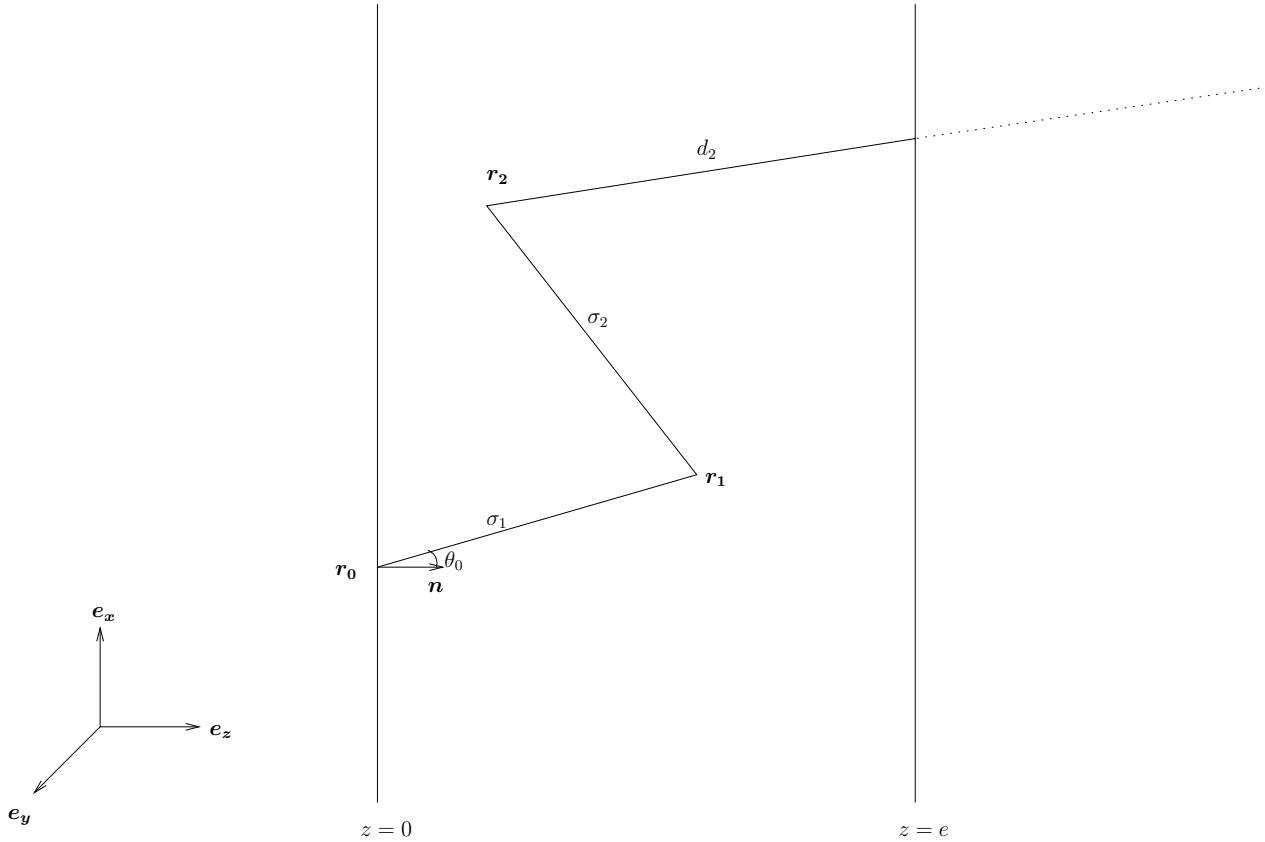


FIG. 3.17 – Représentation des notations utilisées pour formuler A sur un exemple de chemin optique à deux événements de diffusions

distance que doit parcourir le paquet de photons avant de sortir de la couche. Si $\sigma_1 > d_0$, le paquet de photons sort de la couche ($H(\sigma_1 - d_0) = 1$). On calcule alors la fraction d'énergie absorbée par la couche qui est égale à $1 - e^{-k_a d_0}$ et on arrête la simulation du trajet optique. Si $d_0 > \sigma_1$ ($H(\sigma_1 - d_0) = 0$), le paquet de photons est diffusé à l'intérieur de la couche ; on continue alors la simulation du chemin optique. A s'écrit alors sous la forme :

$$A = \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + H(d_0 - \sigma_1) \dots \right\} \quad (3.3.33)$$

Si $\sigma_1 < d_0$, on génère aléatoirement une direction de diffusion \mathbf{u}_1 selon la fonction de phase. On ajoute alors une intégrale sur les 4π d'angle solide (sphère unité) :

$$\begin{aligned} A = & \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + \right. \\ & \left. H(d_0 - \sigma_1) \int_{4\pi} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \dots \right\} \end{aligned} \quad (3.3.34)$$

Ensuite, on tire aléatoirement une seconde abscisse curviligne $\sigma_2 \in \mathbb{R}^+$ (l'abscisse curviligne a comme origine la position de diffusion précédente \mathbf{r}_1 et est dirigé selon une demi-droite de

direction \mathbf{u}_1) :

$$A = \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + H(\sigma_1 - d_0) \int_{4\pi} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \dots \right\} \quad (3.3.35)$$

Comme précédemment, l'algorithme dépend de cette position de diffusion σ_2 . On introduit alors la distance d_1 qui est la distance que doit parcourir le paquet de photons à partir du point \mathbf{r}_1 pour sortir de la couche²⁵. Si $\sigma_2 > d_1$ alors le paquet de photons sort de la couche et on arrête la simulation du trajet optique. La fraction d'énergie absorbée par la couche lors de ce chemin optique est alors $1 - e^{-k_a(\sigma_1+d_1)}$. Si $d_1 > \sigma_2$, il reste dans la couche et on continue la simulation :

$$A = \int_{2\pi} \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + H(d_0 - \sigma_1) \int_{4\pi} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \left\{ H(\sigma_2 - d_1)(1 - e^{-k_a(\sigma_1+d_1)}) + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \right\} \quad (3.3.36)$$

On doit ainsi empiler les intégrales indéfiniment ce qui se traduit par un domaine d'intégration de dimension infinie. On introduit les densités de probabilités et on réécrit A sous la forme suivante (ce type de réécriture est commenté dans le paragraphe 2.2.2 du chapitre précédent) :

$$A = \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1} d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \dots w(\mathbf{u}_0, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2 \dots) \quad (3.3.37)$$

où le poids de Monte-Carlo associée au calcul de A apparaît comme :

$$w(\mathbf{u}_0, \sigma_1, \dots) = H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0}) + H(d_0 - \sigma_1) \left\{ H(\sigma_2 - d_1)(1 - e^{-k_a(\sigma_1+d_1)}) + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \quad (3.3.38)$$

Ce poids est égal à une somme infinie de termes dont un seul est non nul. Par exemple si $\sigma_1 > d_0$ (ce qui signifie que le paquet de photons est sorti de la couche sans subir de diffusion), seul le terme $H(\sigma_1 - d_0)(1 - e^{-k_a d_0})$ est non-nul.

2. Travaux de reformulation permettant d'écrire une expression de la grandeur A sous une forme adaptée au calcul de la dérivée En l'état actuel, la sensibilité $\partial_e A$ ne peut pas être calculée sans utiliser de fonction Dirac. Nous allons donc reformuler A en supprimant de l'expression ces fonctions heaviside à l'origine des difficultés. En notant que $\forall i \in \mathbb{N}^*$, on a :

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_i} d\sigma_i \left\{ H(\sigma_i - d_{i-1})(1 - e^{-k_a d_{i-1}}) + H(d_{i-1} - \sigma_i) \dots \right\} = \\ \int_{d_{i-1}}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_i} d\sigma_i (1 - e^{-k_a d_{i-1}}) + \int_0^{d_{i-1}} k_d e^{-k_d \sigma_i} d\sigma_i \dots \end{aligned} \quad (3.3.39)$$

²⁵Si \mathbf{u}_1 est dirigé vers la face de la couche ayant comme équation $z = e$ (ce qui se traduit par $\cos \theta_1 > 0$), alors $d_1 = \frac{e-z_1}{\cos \theta_1}$. Si \mathbf{u}_1 est dirigé vers la face de la couche ayant comme équation $z = 0$ (ce qui se traduit par $\cos \theta_1 < 0$), alors $d_1 = \frac{-z_1}{\cos \theta_1}$ (voir la figure 3.17).

où d_{i-1} est la distance que doit parcourir le paquet de photons depuis le point de diffusion \mathbf{r}_{i-1} pour sortir de la couche. On applique cette relation sur l'expression 3.3.36 et on obtient :

$$\begin{aligned} A &= \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \left\{ \int_{d_0}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 (1 - e^{-k_a d_0}) + \right. \\ &\quad \int_0^{d_0} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \int_{4\pi} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \left\{ \int_{d_1}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 (1 - e^{-k_a (\sigma_1 + d_1)}) + \right. \\ &\quad \left. \left. \int_0^{d_1} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3.3.40)$$

Avec cette expression, le domaine d'intégration dépend du paramètre e (puisque les distances $d_i|_{\{i \in \mathbb{N}\}}$ sont dépendantes de e) ; $\partial_e A$ est donc maintenant une sensibilité au domaine²⁶. Nous pouvons donc appliquer la méthodologie de calcul de sensibilité au domaine en nous basant sur cette expression 3.3.40.

Remarque importante : cette nouvelle formulation n'est plus adaptée à l'algorithme initial de la figure 3.16. Nous allons donc baser nos développements permettant l'estimation d'une sensibilité au domaine sur une formulation autre que celle adaptée à l'algorithme initial. Ceci n'a de sens que si l'on peut revenir, une fois que la sensibilité est exprimée, à la formulation adaptée à l'algorithme initial (voir le point 4. de notre démarche méthodologique).

3. Calcul de la vitesse de déformation du domaine et expression de la sensibilité

La formulation de A de l'équation 3.3.40 est une somme d'intégrale $A = A_1 + A_2 + \dots$ où, $\forall i \in \mathbb{N}$, on pose

$$\begin{aligned} A_i &= \int_{2\pi} \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} d\mathbf{u}_0 \int_0^{d_0} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \int_{4\pi} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \dots \\ &\quad \int_{d_{i-1}}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_i} d\sigma_i (1 - e^{-k_a (\sigma_1 + \dots + \sigma_{i-1} + d_{i-1})}) \\ &= \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \int_0^{d_0} d\sigma_1 \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \dots \int_{d_{i-1}}^{+\infty} d\sigma_i g_i(\mathbf{u}_0, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots, \sigma_i) \end{aligned} \quad (3.3.41)$$

avec

$$g_i(\mathbf{u}_0, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots, \sigma_i) = \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} k_d e^{-k_d \sigma_1} \Phi(\sigma_1, \mathbf{u}_0 \rightarrow \mathbf{u}_1) \dots k_d e^{-k_d \sigma_i} (1 - e^{-k_a (\sigma_1 + \dots + \sigma_{i-1} + d_{i-1})}) \quad (3.3.42)$$

$A_i|_{\{i \in \mathbb{N}\}}$ a comme domaine d'intégration $D_i|_{\{i \in \mathbb{N}\}}$:

$$D_i = 2\pi \times [0, d_0] \times 4\pi \times [0, d_1] \times \dots \times [d_{i-1}, +\infty] \quad (3.3.43)$$

Chacun de ces termes correspond à la contribution d'un ensemble de chemins optiques avec un même nombre d'évènement de diffusions. Par exemple $A_i|_{\{i \in \mathbb{N}\}}$ est une intégrale sur l'espace des chemins optiques à $(i-1)|_{\{i \in \mathbb{N}^+\}}$ diffusions. La sensibilité $\partial_e A$ peut alors s'écrire sous la forme :

$$\partial_e A = \partial_e A_1 + \partial_e A_2 + \dots$$

²⁶On remarque qu'avec la formulation 3.3.37, $\partial_e A$ était définie comme une sensibilité paramétrique

avec $\forall i :$

$$\partial_e A_i = \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \int_0^{d_0} d\sigma_1 \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \dots \int_{d_{i-1}}^{+\infty} d\sigma_i \left[\partial_e g_i + \nabla \cdot (g_i \mathbf{V}_{ei}) \right] \quad (3.3.44)$$

\mathbf{V}_{ei} est calculé à partir du domaine D_i en appliquant les formules données aux équations 3.2.18 et 3.2.19. On obtient après développement²⁷ ²⁸

$$\mathbf{V}_{ei} = \begin{pmatrix} V_{\varphi_0,e} = 0 \\ V_{\theta_0,e} = 0 \\ V_{\sigma_1,e} = \frac{\sigma_1}{e} \\ \vdots \\ V_{\sigma_{i-1},e} = \frac{\sigma_{i-1}}{e} \\ V_{\varphi_{i-1},e} = 0 \\ V_{\theta_{i-1},e} = 0 \\ V_{\sigma_i,e} = \frac{d_{i-1}}{e} \end{pmatrix} \quad (3.3.45)$$

$\partial_e A$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \partial_e A = & \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \left\{ \int_{d_0}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left[\partial_e g_1 + \nabla \cdot (g_1 \mathbf{V}_{e1}) \right] + \int_0^{d_0} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \int_{4\pi} \frac{d\mathbf{u}_1}{4\pi} \right. \\ & \left. \int_{d_1}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \left[\partial_e g_2 + \nabla \cdot (g_2 \mathbf{V}_{e2}) \right] + \left\{ \int_0^{d_1} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3.3.46)$$

4. Retour à une formulation de la sensibilité $\partial_e A$ adaptée à l'algorithme de calcul de A Nous reformulons donc ici l'équation 3.3.46 dans le but d'obtenir une expression adaptée à l'algorithme initial. Pour cela, il nous faut réintroduire les fonctions heaviside que nous avions

²⁷La distance d_0 est égale à $d_0 = \frac{e}{\cos \theta_0}$ où θ_0 est l'angle polaire de \mathbf{u}_0 . On commence par calculer $V_{\sigma_1,e}$:

$$V_{\sigma_1,e}(\sigma_1; e) = \frac{\partial_e d_0}{d_0} \sigma_1 = \frac{\sigma_1}{e}$$

Pour calculer $V_{\sigma_2,e}(\sigma_1, \sigma_2; e) = \frac{V_{\sigma_2,e}(\sigma_1, d_1; e)}{d_1} \sigma_2$, on commence par déterminer $V_{\sigma_2,e}(\sigma_1, d_1; e)$. La distance d_1 est égale soit à $d_1 = \frac{e - \sigma_1 \cos \theta_0}{e \cos \theta_1}$, soit à $d_1 = \frac{-\sigma_1 \cos \theta_0}{e \cos \theta_1}$. Quel que soit l'expression de d_1 , on trouve au final :

$$V_{\sigma_2,e}(\sigma_1, d_1; e) = \frac{d_1}{e}$$

On déduit alors $V_{\sigma_2,e}$:

$$V_{\sigma_2,e}(\sigma_1, \sigma_2; e) = \frac{V_{\sigma_2,e}(\sigma_1, d_1; e)}{d_1} \sigma_2 = \frac{\sigma_2}{e}$$

On poursuit alors de la même façon pour les composantes suivantes.

²⁸Dans le cas où le sous-domaine d'intégration associé à une composante de la vitesse a une borne infinie (comme pour $\sigma_i \in [d_{i-1}, +\infty[$), on suppose que la composante de la vitesse est constante. Par exemple pour $V_{\sigma_i,e}$, on a :

$$V_{\sigma_i,e}(\sigma_i, e) = V_{\sigma_i,e}(d_{i-1}, e) = \frac{d_{i-1}}{e}$$

Ceci revient à supposer que $V_{\sigma_i,e}(\sigma_i \rightarrow +\infty, e)$ est égal à $\frac{d_{i-1}}{e}$. Il est ainsi permis de choisir $V_{\sigma_i,e}(\sigma_i \rightarrow +\infty, e)$ arbitrairement car la fonction à intégrer g_i s'annule lorsque $\sigma_i \rightarrow +\infty$ (sinon l'intégrale serait divergente).

supprimées pour exprimer la sensibilité. En effectuant les développements inverses de ceux présentés au point 2. de notre démarche méthodologique, il est aisément de réécrire $\partial_e A$ sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_e A = & \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \left\{ H(\sigma_1 - d_0) \left[\partial_e g_1 + \nabla \cdot (g_1 \mathbf{V}_{e1}) \right] + \right. \\ & H(d_0 - \sigma_1) \int_{4\pi} \frac{d\mathbf{u}_1}{4\pi} \int_0^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \left\{ H(\sigma_2 - d_1) \left[\partial_e g_2 + \nabla \cdot (g_2 \mathbf{V}_{e2}) \right] + H(d_1 - \sigma_2) \dots \right. \\ & \left. \left. \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3.3.47)$$

Les problèmes de dérivabilité ont ainsi été contournés. Le domaine d'intégration est le même et les conditions d'arrêt de l'algorithme décrites par les fonctions $H(\sigma_i - d_{i-1})|_{\{i \in \mathbb{N}\}}$ et $H(d_{i-1} - \sigma_i)|_{\{i \in \mathbb{N}\}}$ sont aussi les mêmes. En utilisant les mêmes densités de probabilités, nous pouvons alors estimer simultanément A et $\partial_e A$. Nous discutons des résultats obtenus dans la suite de ce chapitre après les remarques suivantes.

Remarques

- Il faut noter que le calcul des vitesses $\mathbf{V}_{e1}, \dots, \mathbf{V}_{e(i-1)}, \mathbf{V}_{ei}, \dots$ ne pose pas de difficulté particulière d'un point de vue algorithmique. Le vecteur vitesse a une dimension supplémentaire à chaque nouveau tirage aléatoire, tant que le paquet de photons reste dans la couche. Les composantes de la vitesse sont alors calculées au fur et à mesure que la dimension augmente (d'un point de vue formel au fur et à mesure que les intégrales s'empilent dans l'écriture intégrale), jusqu'à la sortie de la couche du paquet de photons.
- Cette démarche méthodologique se base sur des travaux de formulation intégrale. Tant qu'il est possible de retourner à une formulation de la sensibilité adaptée à l'algorithme, nous avons la possibilité de travailler sur des formulations de la grandeur différentes : par exemple, dans le cas présenté ci-dessus, nous avons obtenu la formulation correspondante à l'équation 3.3.40. Il est cependant encore possible de développer cette expression, en remarquant que $\forall i \in \mathbb{N}$,

$$\int_{d_{i-1}}^{+\infty} k_d e^{-k_d \sigma_i} d\sigma_i (1 - e^{-k_a(\sigma_1 + \dots + \sigma_{i-1} + d_{i-1})}) = e^{-k_d d_{i-1}} (1 - e^{-k_a(\sigma_1 + \dots + \sigma_{i-1} + d_{i-1})}) \quad (3.3.48)$$

Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} A = & \int_{2\pi} d\mathbf{u}_0 \frac{\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n}}{\pi} \left\{ e^{-k_d d_0} (1 - e^{-k_a d_0}) + \int_0^{d_0} k_d e^{-k_d \sigma_1} d\sigma_1 \right. \\ & \left. \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} d\mathbf{u}_1 \left\{ e^{-k_d d_1} (1 - e^{-k_a (\sigma_1 + d_1)}) + \int_0^{d_1} k_d e^{-k_d \sigma_2} d\sigma_2 \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3.3.49)$$

Nous pouvons alors exprimer la sensibilité en nous basant sur cette nouvelle formulation de A et retourner par la suite à une formulation adaptée à l'algorithme.

Il faut noter que si ces deux expressions de A diffèrent, l'expression finale 3.3.47 de la sensibilité $\partial_e A$ (après le retour à une forme adaptée à l'algorithme de calcul) reste la même. Ceci nous laisse donc le libre choix quant à la formulation de la grandeur sur laquelle on souhaite développer une première expression de la sensibilité.

Résultats et discussions

Les résultats sont présentés en fonction des trois paramètres e , k_a et k_d dans le cas d'une diffusion isotrope ($\phi = \frac{1}{4\pi}$).

k_a	k_s	e	A	σ_A	$\frac{1}{k_s+k_a}\partial_e A$	$\frac{1}{k_s+k_a}\sigma_{\partial_e A}$
1	1	0.001	$1, 99.10^{-3}$	$2, 98.10^{-6}$	0, 991	$2, 08.10^{-3}$
1	1	0.5	0, 559	$1, 96.10^{-4}$	0, 304	$7, 14.10^{-4}$
1	1	1	0, 748	$2, 22.10^{-4}$	0, 107	$6, 09.10^{-4}$
1	1	2	0, 840	$2, 45.10^{-4}$	$1, 35.10^{-2}$	$4, 80.10^{-4}$
1	1	10	0.853	$2, 52.10^{-4}$	$3, 43.10^{-5}$	$2, 23.10^{-4}$
1	0	1	0, 780	$1, 10.10^{-4}$	0, 297	$9, 78.10^{-5}$
1	0.5	1	0, 767	$1, 80.10^{-4}$	0, 169	$5, 70.10^{-4}$
1	1	1	0, 748	$2, 22.10^{-4}$	0, 107	$6, 09.10^{-4}$
1	2	1	0, 707	$2, 74.10^{-4}$	$5, 03.10^{-2}$	$5, 87.10^{-4}$
1	10	1	0, 501	$3, 62.10^{-4}$	$1, 45.10^{-3}$	$3, 79.10^{-4}$
0.001	1	1	$1, 99.10^{-3}$	$1, 54.10^{-6}$	$1, 99.10^{-3}$	$5, 80.10^{-6}$
0.5	1	1	0, 551	$2, 25.10^{-4}$	0, 184	$6, 79.10^{-4}$
1	1	1	0, 748	$2, 22.10^{-4}$	0, 107	$6, 09.10^{-4}$
2	1	1	0, 887	$1, 87.10^{-4}$	$3, 02.10^{-2}$	$4, 48.10^{-4}$
10	1	1	0, 980	$9, 77.10^{-5}$	$-7, 89.10^{-5}$	$1, 28.10^{-4}$

TAB. 3.3 – Estimations par la méthode de Monte-Carlo de A et de sa sensibilité à l'épaisseur e de la couche. σ_A et $\sigma_{\partial_e A}$ représente les écart-types. Le nombre d'échantillons utilisé est $N = 10^6$. Les résultats étant adimensionnés, les unités sont arbitraires pour k_a , k_s et e .

Le calcul de sensibilité ne pose pas de problème de convergence excepté dans les cas où le milieu est optiquement épais (ceci provient du fait que la sensibilité est quasi-nulle). Comme lors du premier exemple du paragraphe 3.3.1, le tableau 3.4 présente des résultats comparatifs entre le calcul de sensibilité au domaine par Monte-Carlo et le calcul de sensibilité standard. $\frac{t^+}{t_0}$ représente le rapport des temps de calcul avec sensibilité (t^+) et sans sensibilité (t_0). Le temps $t_{\text{std}}^{5\%}$ est le temps estimé pour un calcul de sensibilité par la méthodologie standard avec une variation du paramètre de 5%. On note que la méthodologie proposée permet d'avoir des temps 5 à 2000 fois inférieurs à la procédure de différentiation numérique standard. Dans la dernière colonne, Δe représente la variation du paramètre e nécessaire au calcul de sensibilité avec la méthodologie standard, pour obtenir la même incertitude avec un temps de calcul égal à $2t_0$. Comme dans l'exemple précédent du paragraphe 3.3.1, ces plages de variations sont supérieures à celle communément utilisées en différentiation numérique.

k_a	k_s	e	$\frac{t^+}{t_0}$	$\frac{t^{5\%}}{t_0}$	$\frac{\Delta e}{e}$
1	1	0.001	1,12	821	1,01
1	1	0.5	1,14	121	0,388
1	1	1	1,11	53,2	0,258
1	1	2	1,12	26,1	0,180
1	1	10	1,11	5,11	$7,99 \cdot 10^{-2}$
1	0	1	1,23	$2,02 \cdot 10^3$	1,59
1	0.5	1	1,12	70,9	0,298
1	1	1	1,11	53,2	0,258
1	2	1	1,12	38,7	0,220
1	10	1	1,089	12,1	0,123
0.001	1	1	1,11	113	0,375
0.5	1	1	1,11	78,1	0,312
1	1	1	1,11	53,2	0,258
2	1	1	1,099	31,0	0,197
10	1	1	1,087	7,70	$9,81 \cdot 10^{-2}$

TAB. 3.4 – Comparaison des temps de calculs et des écart-types des estimations de sensibilités par la méthodologie de calcul simultanée par MMC et par un méthode standard de différentiation numérique

Chapitre 4

Mise en oeuvre dans le domaine des transferts radiatifs

Au cours de ce chapitre nous allons présenter divers exemples d'application du calcul de sensibilité par MMC. Ces exemples vont nous permettre d'une part de discuter de certaines difficultés de mise en oeuvre de la méthodologie décrite dans le chapitre précédent et d'autre part d'illustrer certaines perspectives d'utilisation du calcul de sensibilités par MMC.

Ces applications portent sur le calcul de transferts radiatifs dans des contextes scientifiques différents. Nous nous intéresserons à des problématiques posées en imagerie optique et à un exemple tout à fait académique d'étude d'une déformation géométrique d'un système. Ce dernier exemple a pour but d'illustrer l'apport du calcul de sensibilités à la déformation du domaine dans le cadre des méthodes inverses de dimensionnement (“inverse design”) ou de l'animation des images de synthèse.

Tout au long de ce chapitre, nous essaierons de mettre en relief les difficultés d'ordre méthodologique que nous avons rencontrées au cours des développements du calcul de sensibilités. Nous avons vu dans les chapitres précédents que les développements sont basés sur des écritures intégrales, elles-mêmes basées sur l'algorithme de MMC choisi pour estimer la grandeur et les sensibilités. Ainsi, si notre objectif initial a toujours été d'appliquer la méthodologie de calcul de sensibilité par MMC, il arrivera régulièrement que nous orientions la discussion essentiellement sur le choix de l'algorithme de départ donc sur les exercices de formulation intégrale plutôt que sur le développement du calcul de sensibilités lui-même. En effet, une fois que les problèmes de formulation sont résolus, l'expression de la sensibilité elle-même ne pose généralement pas de difficulté particulière (excepté la difficulté liée aux problèmes de dérivabilité que nous avons déjà mentionnée au chapitre précédent, paragraphe 3.3.2).

Ce chapitre sera divisé en quatre parties distinctes :

- Dans la première partie, nous discuterons brièvement d'exemples de calculs de sensibilités paramétriques. Nous mettrons l'accent sur un exemple académique inspiré d'une problématique posée en imagerie médicale. Ces exemples n'ont posé aucune difficulté particulière de développement mais nous permettent d'illustrer certaines applications potentielles du calcul de sensibilité paramétrique.
- Dans la seconde partie, nous nous intéresserons au calcul de transferts radiatifs instationnaires et nous présenterons un exemple de calcul de la sensibilité temporelle d'un signal radiatif (ou sensibilité au temps de ce signal). Nous discuterons alors des difficultés en termes de calcul de

sensibilité, que peut poser le traitement de l'instationnarité des transferts radiatifs, difficultés qui nous conduiront à nous intéresser en détail aux différences entre un algorithme direct et un algorithme inverse.

- Dans la troisième partie, nous aborderons les problèmes de type source-détecteur, qui concernent le calcul de la transmission d'un signal radiatif depuis une source d'émission de petite taille et directionnelle jusqu'à un détecteur, également de petite taille et directionnel. Nous discuterons alors des difficultés que pose ce type de problème lors de la simulation numérique par MMC et nous essaierons de montrer l'apport des exercices de formulations intégrales pour surmonter ces difficultés.
- Dans la quatrième partie, à travers un exemple académique, nous nous questionnerons sur les difficultés inhérentes aux calculs d'intersection dans le cadre du calcul de sensibilité à la déformation du domaine.

4.1 Exemples d'applications du calcul de sensibilités paramétriques

Le calcul de sensibilités paramétriques par la méthode de Monte-Carlo a été utilisée dans plusieurs études au laboratoire d'Energétique et au Laboratoire de Génie des Procédés des Solides divisés[4, 9, 1]¹. Parmi ces travaux, on peut citer l'étude des transferts radiatifs dans des systèmes en combustion développée au cours de la thèse d'A. de Lataillade[1]. Le traitement du couplage des transferts radiatifs avec d'autres modes de transferts thermiques reste une difficulté majeure dans le cadre de la simulation numérique des systèmes en combustion[63]. A de Lataillade[1, 64] a développé un modèle de couplage des transferts radiatifs avec la cinétique chimique des gaz dans une flamme monodimensionnelle à jets opposés. L'approche qu'il a explorée consiste à utiliser le calcul simultané des sensibilités pour établir un modèle de couplage basé sur un développement de Taylor au premier ordre. Pour atteindre la solution stationnaire du problème de combustion considéré, plusieurs itérations sont nécessaires. Pour éviter de calculer le terme source radiatif S_R à chaque nouvelle itération par un calcul Monte-Carlo, le modèle de couplage consiste à calculer à la première itération $t = t_0$, le terme S_R et ses sensibilités aux paramètres pertinents du problème (la température T et les concentrations d'espèces X_k). On utilise alors le développement de Taylor au premier ordre pour calculer le terme source à t à partir de matrice Jacobienne constante prise en t_0 :

$$S_R(\mathbf{r}) \Big|_t = S_R(\mathbf{r}) \Big|_{t_0} + (T(\mathbf{r}) \Big|_t - T(\mathbf{r}) \Big|_{t_0}) \frac{\partial S_R(\mathbf{r})}{\partial T} \Big|_{t_0} + \sum_{k=1}^{Nk} (X_k(\mathbf{r}) \Big|_t - X_k(\mathbf{r}) \Big|_{t_0}) \frac{\partial S_R(\mathbf{r})}{\partial X_k} \Big|_{t_0} \quad (4.1.1)$$

où Nk est le nombre d'espèces chimiques rayonnantes (CO, CO₂ et H₂O dans une flamme). Ce modèle de couplage donne de bons résultats tant que l'évolution du terme source en fonction des paramètres a un comportement quasi-linéaire. Si l'hypothèse de linéarité de l'évolution du terme source n'est plus valable, il est alors nécessaire de relancer un calcul Monte-Carlo (avec l'estimation simultanée des sensibilités).

On peut citer comme autres applications les travaux développés au cours de la thèse de Vincent Eymet[3]. Pour une meilleure compréhension et prédiction des conséquences de l'émis-

¹Nous discutons de ces travaux dans [62]

sion des gaz à effet de serre sur le climat, de nombreux efforts sont portés sur l'analyse de l'influence de la diffusion par des particules en suspension dans l'atmosphère et par les nuages[49].

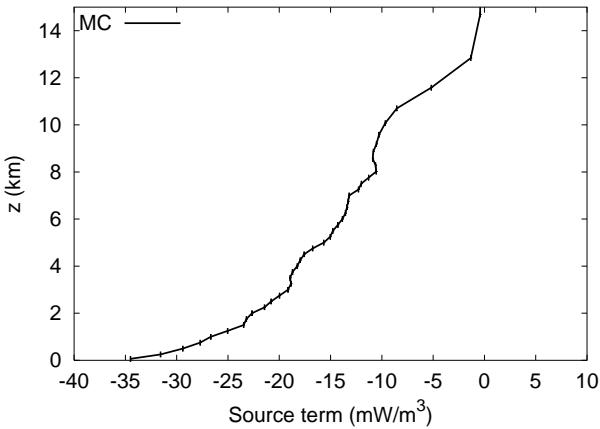


FIG. 4.1 – Terme source dans une atmosphère avec un ciel clair

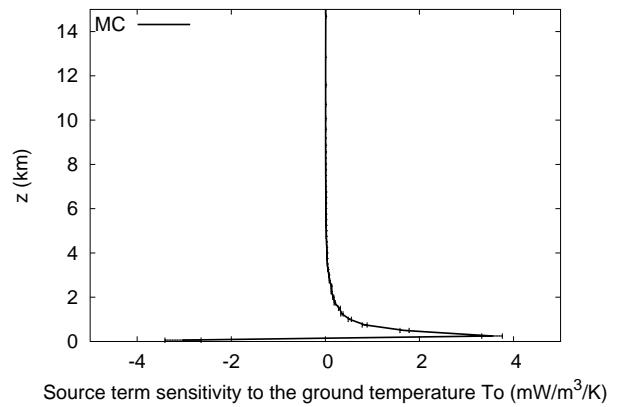


FIG. 4.2 – Sensibilité du terme source à la température du sol

V. Eymet a développé un code basé sur la méthode de Monte-Carlo simulant les échanges radiatifs dans l'atmosphère. Nous nous sommes alors servi de ce code pour calculer la sensibilité de ces échanges à la température du sol. L'estimation de cette sensibilité n'a nécessité que le calcul de la dérivée de la luminance de Planck à la température au niveau du sol (le sol étant considéré comme un corps noir dans son modèle). Cette sensibilité (voir figure 4.1 et 4.2 présentant les résultats pour une atmosphère à une latitude moyenne en été avec un ciel clair) a donné des informations sur la zone d'influence du sol sur les transferts radiatifs. Sur la figure 4.2, on remarque que cette zone d'influence s'étend jusqu'à 2 km d'altitude dans le cas d'une atmosphère avec un ciel clair à une latitude moyenne.

Dans la suite de ce paragraphe, nous allons présenter un exemple académique de calcul de sensibilité paramétrique inspiré de problématiques posées en imagerie médicale sur la détection d'inhomogénéités². La détection et la caractérisation d'objets étrangers dans des milieux difusants par l'utilisation de techniques de tomographie optique est utilisée dans de nombreuses applications en imagerie médicale[65]. Diverses études numériques et expérimentales ont porté sur la détection d'une inhomogénéité (comme une tumeur) en analysant un signal diffusé dans un tissu biologique[66, 67, 68, 69]. Notre objectif est d'illustrer sur un exemple académique le type de résultats que l'on peut obtenir avec le calcul simultané de sensibilités.

Description de l'exemple académique de détection d'inhomogénéités Nous allons considérer la propagation d'un signal radiatif à travers une couche monodimensionnelle. Le signal radiatif incident dans la couche est monochromatique et unidirectionnel. La direction d'incidence, notée \mathbf{u}_S , est perpendiculaire à la face de la couche $z = 0$ soumise à ce signal $\mathbf{u}_S = \mathbf{e}_z$ (voir figure 4.3). La source d'émission radiative est ponctuelle (son vecteur position est noté \mathbf{r}_S). Nous allons calculer la fraction d'énergie transmise par la couche. Nous appellerons cette grandeur la transmittance. La couche est supposée purement diffusante avec un coefficient

²Tout en sachant que l'équipe n'a pas de compétences sur la thématique médicale elle-même

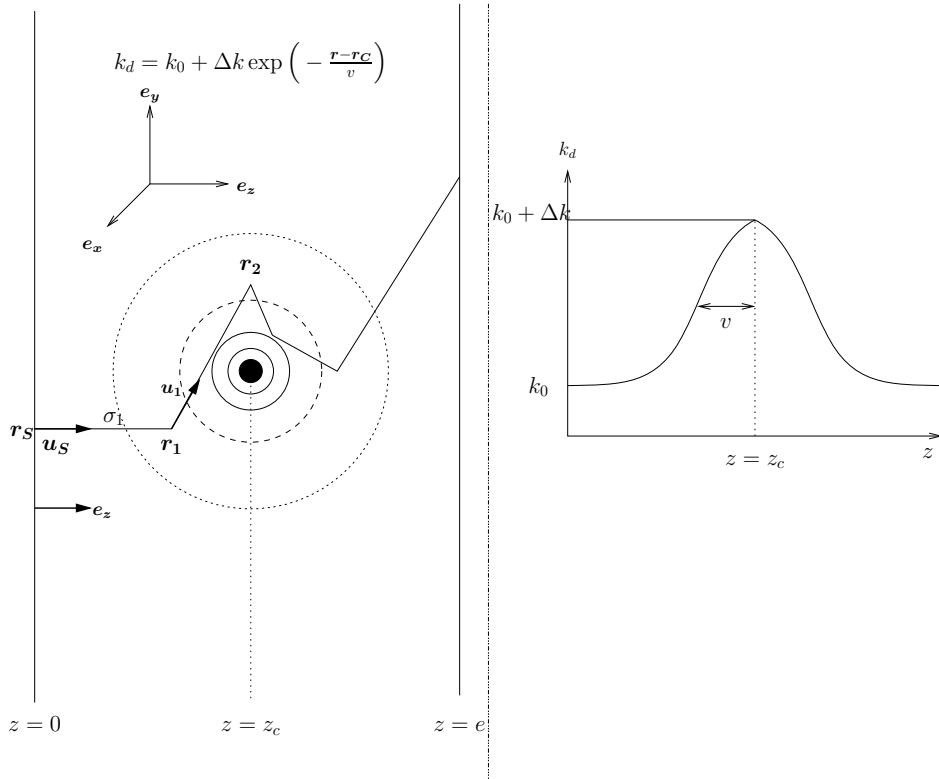


FIG. 4.3 – Description de l'exemple académique de détection d'inhomogénéité

de diffusion hétérogène de la forme

$$k_d(\mathbf{r}) = k_0 + \Delta k \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c\|^2}{v}\right) \quad (4.1.2)$$

$\Delta k \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c\|^2}{v}\right)$ représente l'inhomogénéité. Sa distribution est de type gaussienne. La position \mathbf{r}_c représente le centre de cette distribution, v la variance et Δk son amplitude. k_0 est le coefficient de diffusion du milieu sans hétérogénéité. La diffusion est supposée isotrope.

Nous allons calculer la transmittance T et ses sensibilités à tous les paramètres descriptifs de l'inhomogénéité avec l'algorithme décrit ci-après.

Algorithme de calcul de T et de ses sensibilités Nous estimons T par un algorithme analogue consistant à suivre le trajet optique de N photons et à calculer le pourcentage de photons transmis. La formulation intégrale associée à cet algorithme est la suivante :

$$T = \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2 \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_2}(\mathbf{u}_2) \dots w(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \mathbf{u}_2, \dots) \quad (4.1.3)$$

Les densités de probabilités choisies pour générer aléatoirement les directions de diffusion sont égales à la fonction de phase :

$$\forall i \in \mathbb{N}^+, p_{\mathbf{U}_i}(\mathbf{u}_i) = \Phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{u}_{i-1} \rightarrow \mathbf{u}_i) = \frac{1}{4\pi} \quad (4.1.4)$$

Pour la génération aléatoire d'une position de diffusion, la densité de probabilité $p_{\Sigma_i}(\sigma_i) = k_d \exp\left(-\int_0^{\sigma_i} k_d(\sigma)d\sigma\right)$ ne peut pas être utilisée car la fonction de distribution cumulée $g(\sigma_i) = \int_0^{\sigma_i} p_{\Sigma_i}(\sigma_i)d\sigma_i$ ne peut pas être inversée analytiquement. Nous décrivons dans l'annexe A les calculs qui nous ont conduit à choisir la densité de probabilité suivante :

$$p_{\Sigma_i}(\sigma_i) = \frac{df(\sigma_i)}{d\sigma_i} e^{-f(\sigma_i)} \quad (4.1.5)$$

où $f(\sigma)$ est une fonction que nous définissons en annexe A. La fonction poids associé au calcul de T s'écrit alors :

$$\begin{aligned} w(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \mathbf{u}_2, \dots) &= \frac{k_d(\sigma_1) \exp\left(-\int_0^{\sigma_1} k_d(\sigma)d\sigma\right)}{p_{\Sigma_1}(\sigma_1)} \left\{ H(\sigma_1 - d_0) + \right. \\ &\quad H(d_0 - \sigma_1) \frac{k_d(\sigma_2) \exp\left(-\int_0^{\sigma_2} k_d(\sigma)d\sigma\right)}{p_{\Sigma_2}(\sigma_2)} \left\{ H(\sigma_2 - d_1) H(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{e}_z) + \right. \\ &\quad \left. \left. H(d_1 - \sigma_2) \dots \right\} \right\} \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

Nous reprenons ici les mêmes notations que celles décrites dans l'exemple du paragraphe 3.3.2 du chapitre précédent. $\forall i$, σ_i est l'abscisse curviligne de la i ème diffusion. d_i est la distance que doit parcourir le photon pour sortir de la couche après i diffusions. Les fonctions heaviside $H(\sigma_{i+1} - d_i)$ et $H(d_i - \sigma_{i+1})$ traduisent la condition sur la sortie ou non du photon du système après i diffusions. Si le photon sort de la couche $H(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{e}_z)$ traduit la condition sur la transmission ou non du photon. Si le photon sort de la couche par la face $z = 0$ alors $H(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{e}_z)$ est nul, s'il sort de l'autre côté de la couche alors le photon est transmis et $H(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{e}_z) = 1$.

Les sensibilités aux paramètres k_0 , Δk , v , x_C , y_C , z_C (les coordonnées de \mathbf{r}_C) sont toutes paramétriques au sens défini dans les chapitres précédents. Pour calculer la fonction poids associée à chacune de ces sensibilités, nous avons utilisé la relation suivante donnée dans [10] et présentée dans le paragraphe 3.1.1 (on remarque que $\forall i p_{U_i}$ ne dépend d'aucun paramètre) :

$$w_\lambda(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots; \lambda) = \partial_\lambda w(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots; \lambda) + w(\sigma_1, \mathbf{u}_1, \dots; \lambda) \sum_i \frac{\partial_\lambda p_{\Sigma_i}(\sigma_i, \lambda)}{p_{\Sigma_i}(\sigma_i, \lambda)}$$

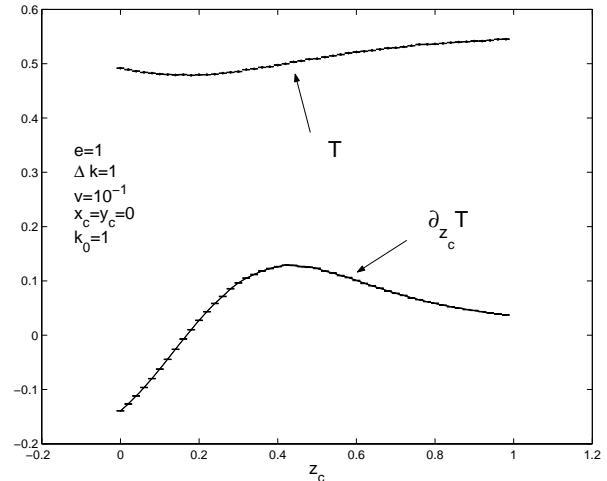
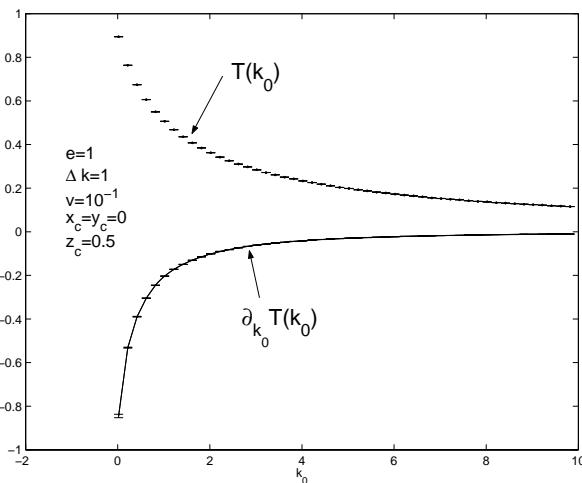
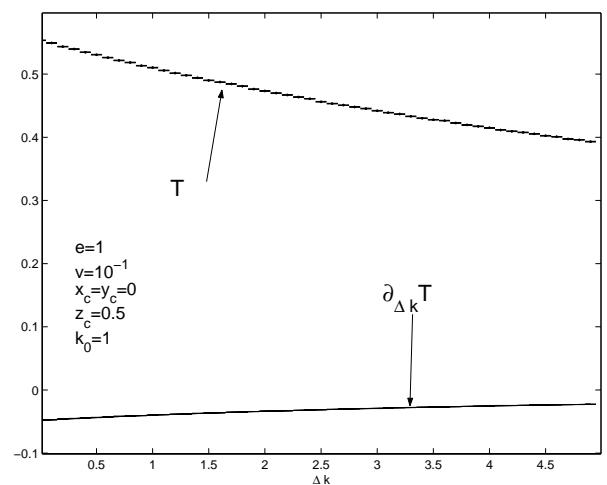
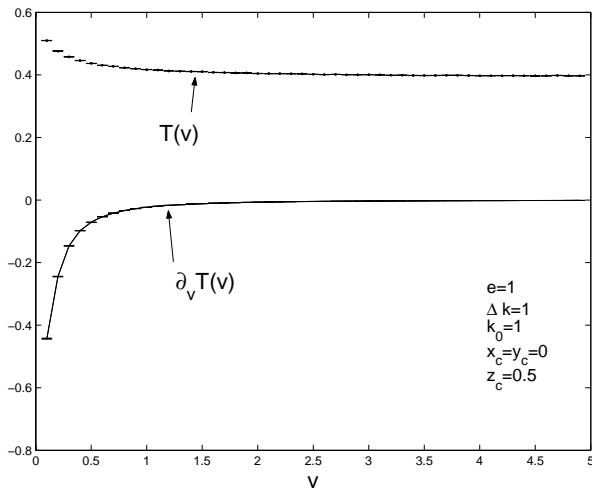
avec $\lambda = \{k_0, \Delta k, v, x_C, y_C, z_C\}$

Résultats Des exemples de résultats sont données sur les figures 4.4, 4.5, 4.6 et 4.7. Les

T et $\partial_{\Delta k} T$	T et $\partial_{k_0} T$	T et $\partial_v T$	T et $\partial_{x_C} T$	T et $\partial_{y_C} T$	T et $\partial_{z_C} T$	T et les 6 sensibilités
$1,18t_0$	$1,05t_0$	$1,58t_0$	$1,39t_0$	$1,49t_0$	$1,49t_0$	$2,28t_0$

TAB. 4.1 – Comparaison des temps supplémentaires dûs aux sensibilités. t_0 est le temps de calcul de T sans sensibilité

écart-types associés aux estimations des sensibilités sont du même ordre de grandeur que ceux associées à l'estimation de T et sont donc satisfaisant.



Le tableau 4.1 présente une comparaison des temps supplémentaires dûs aux calculs de sensibilités. On remarque que pour les sensibilités aux coordonnées de la position \mathbf{r}_C et à la variance v , ces temps sont plus longs à cause des calculs de dérivées qui sont plus importants et donc plus coûteux. Au total, l'estimation simultanée des six sensibilités avec T multiplie le temps t_0 par environ 2,3. Avec une méthode de calcul de sensibilités par différentiation numérique (comme celle décrite au chapitre précédent), chaque paramètre doit être étudié séparément, ce qui implique des temps de calculs beaucoup plus longs que ceux du tableau 4.1 pour des barres d'erreurs équivalentes³.

³voir les paragraphes 3.3.1 et 3.3.2 où sont comparés les temps de calcul et les incertitudes obtenus avec une méthode de calcul simultanée de sensibilités et une méthode par différentiation numérique

4.2 Calcul de la sensibilité au temps d'un signal radiatif

Du fait des récents développements sur les lasers avec des pulses de l'ordre de la picoseconde voire de la femtoseconde, l'étude de la dépendance temporelle des signaux radiatifs en imagerie optique s'est largement développée[65, 70] (ou en télédétection[71, 72]). L'évolution temporelle d'un signal laser transmis à travers un milieu diffusant contient des informations permettant de déterminer les propriétés optiques du milieu. L'étude de l'évolution temporelle est fréquente en imagerie médicale pour déterminer les propriétés optiques des tissus biologiques[73]. Diverses études paramétriques, expérimentales[74, 75] et numériques[76], ont permis de déduire des propriétés optiques d'un milieu de propagation par l'analyse de la pente (la variation du signal en fonction du temps, voir figure 4.8) d'un signal radiatif transmis par ce milieu. De nombreuses

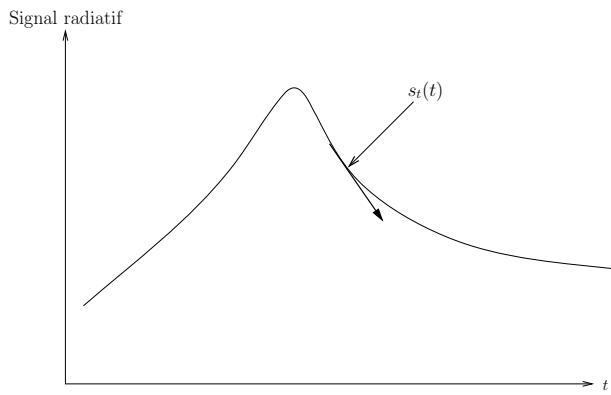


FIG. 4.8 – Représentation graphique de la pente temporelle d'un signal radiatif. Le calcul de la sensibilité $s_t(t)$ d'un signal au temps t donne la valeur de cette pente temporelle

études ont porté sur le calcul numérique des transferts radiatifs instationnaires dans des milieux diffusants pour calculer les évolutions temporelles, et la méthode de Monte-Carlo a fréquemment été employée et développée [77, 78, 79, 80, 81, 82]. Parmi ces études, on peut citer Wan et al[66, 68] qui proposent une méthode d'analyse de la pente d'un signal radiatif temporel permettant de caractériser les propriétés optiques du milieu de propagation du signal. Dans le chapitre précédent, nous avons vu que la méthodologie d'estimation simultanée de sensibilité doit permettre le calcul de cette pente (c'est-à-dire le calcul de la sensibilité temporelle $s_t(t)$ du signal) et que le coût supplémentaire en temps de calcul et les incertitudes statistiques peuvent être très significativement inférieurs à ceux nécessaires dans une étude paramétrique standard. Nous allons donc appliquer cette méthodologie sur un problème instationnaire académique afin de commencer à identifier les questions spécifiques de ce type d'applications en terme de mise en oeuvre d'un calcul de sensibilité.

Description de l'exemple Nous reprenons ici un exemple utilisé dans les travaux de Wu[83] et dans les travaux de Hsu et Lu[80, 84, 82]. Nous considérons une couche monodimensionnelle composée d'un milieu absorbant et diffusant dont une des faces est soumise à un faisceau laser pulsé (voir la figure 4.9). Ce faisceau laser incident est temporel selon une distribution gaussienne :

$$I(t_e) = I_0 \exp \left[-4 \ln 2 \times \left(\frac{t_e - t_c}{t_p} \right)^2 \right] H(t_e - t_{\text{ini}})H(t_{\text{fin}} - t_e) \quad (4.2.1)$$

où t_{ini} est l'instant initial d'émission du pulse et t_{fin} l'instant final ; t_p est la largeur temporelle à mi-hauteur et t_c l'instant où l'intensité est maximale et égale à I_0 l'amplitude du faisceau laser (voir figure 4.9). Cette distribution temporelle est fréquemment utilisée dans la littérature[85, 83, 66, 68]. Le faisceau laser est dirigé selon la direction normale à une des faces de la couche (direction noté $\mathbf{u}_S = \mathbf{n}$) et est étendu sur toute cette face. Nous allons estimer par MMC le

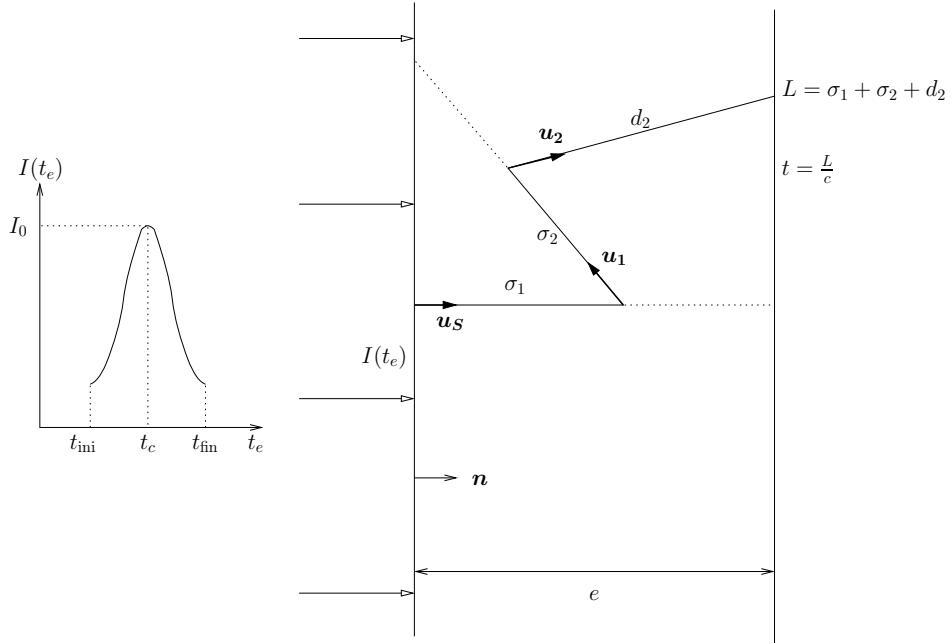


FIG. 4.9 – Description du problème académique instationnaire : on calcule la transmittance temporelle $T(t)$

flux d'énergie transmis par la couche en fonction de l'instant de transmission t . Ce flux est adimensionnalisé par I_0 et sera dorénavant appelé la transmittance temporelle $T(t)$. Par la méthodologie d'estimation simultanée de sensibilité, nous allons aussi estimer la sensibilité au temps $\partial_t T(t)$ de la transmittance.

4.2.1 Discussion sur les algorithmes de Monte-Carlo dans des problèmes instationnaires

Le traitement de l'instationnarité des transferts radiatifs nous a conduit à distinguer deux types d'algorithmes : les algorithmes de Monte-Carlo direct (dont un exemple est donné sur la figure 4.10) et les algorithmes de Monte-Carlo inverses (dont un exemple est donné sur la figure 4.13).

Cas d'un algorithme de Monte-Carlo direct Les algorithmes de Monte-Carlo directs⁴ consistent à suivre un photon (ou un paquet de photons) depuis son point d'émission jusqu'à son point d'absorption ou sa sortie de la couche. Lorsque le problème est instationnaire, ce type d'algorithme consiste à générer aléatoirement un temps t_e d'émission et si on s'intéresse à la transmittance temporelle $T(t)$, à calculer à quel instant t le photon est transmis. Si on note L

⁴voir chapitre 2, paragraphe 2.2.1 pour plus de précision sur ce type d'algorithmes

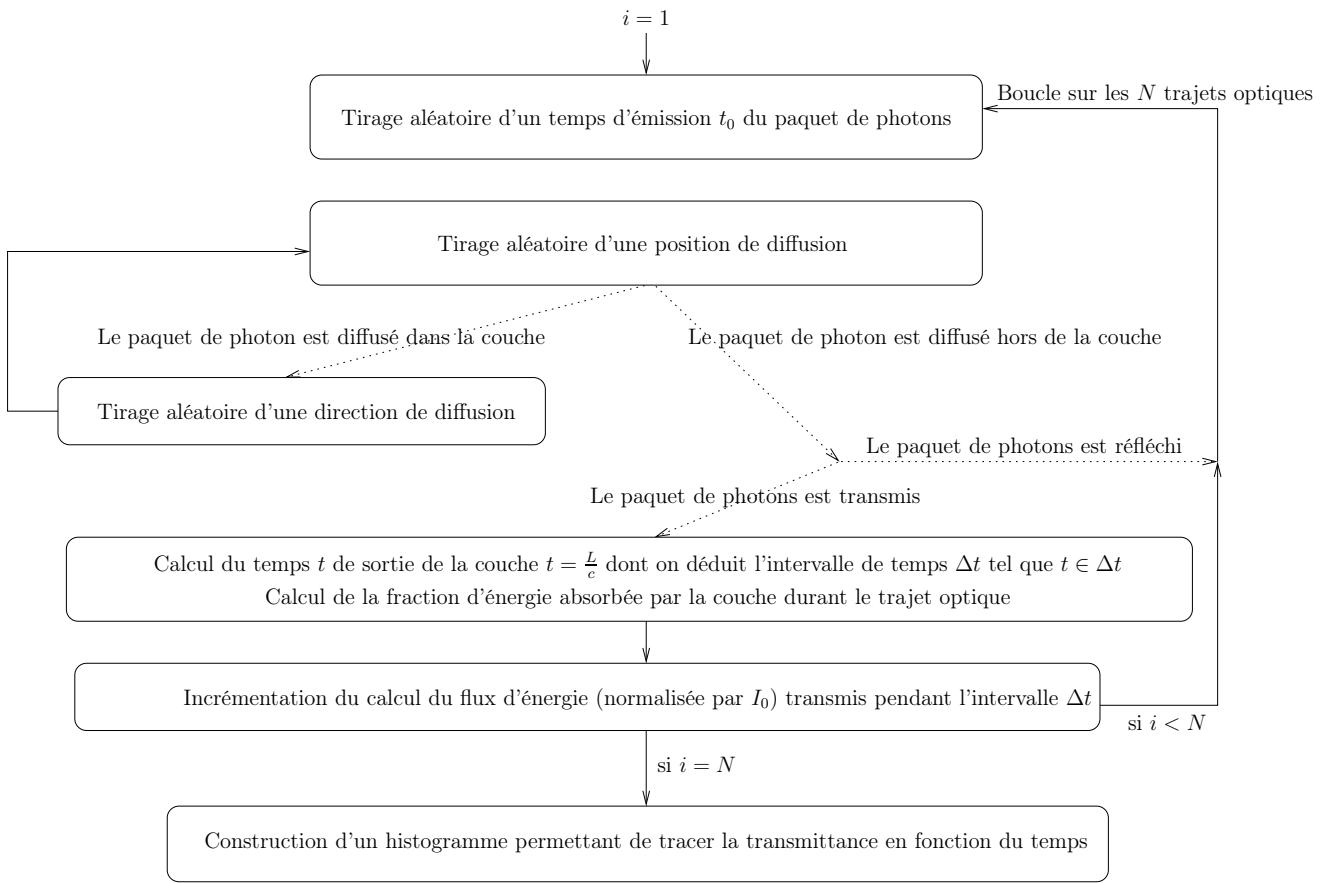


FIG. 4.10 – Exemple d'algorithme direct dans un problème instationnaire : calcul de la transmittance pour un intervalle de temps Δt

la distance totale parcourue par le photon dans la couche et c la vitesse de la lumière dans cette couche, t sera égal à : $t = \frac{L}{c}$.

Par ce type d'algorithme, on ne peut pas calculer la transmittance à un instant t précis puisque t dépend de la distance L et donc de la génération aléatoire du trajet optique du photon dans la couche. Nous sommes contraint de calculer la fraction d'énergie transmise, non pas pour un instant t , mais pour un intervalle de temps Δt . A chaque trajet optique, on calcule à quel intervalle de temps appartient l'instant de transmission du photon et on obtient ainsi une courbe de la transmittance en fonction du temps sous forme d'histogramme comme dans la figure 4.11. A partir d'un tel algorithme, il n'est pas possible d'estimer la sensibilité de la transmittance à l'instant t puisque ce n'est pas le flux d'énergie transmis à l'instant t qui est estimé mais le flux d'énergie transmis pendant un intervalle de temps $\Delta t = [t_i, t_j]$. Nous pourrions estimer la sensibilité de ce flux à un déplacement sur l'axe des temps de cet intervalle $[t_i, t_j] \rightarrow [t_i + \delta t, t_j + \delta t]$, à partir de laquelle on pourrait déduire la pente du signal temporel. Cependant la précision sur ce type d'estimations de la pente, fortement liées à la largeur choisie de Δt , ne serait pas aussi satisfaisante que celle obtenue avec un algorithme de Monte-Carlo inverse où l'incertitude statistique sur les estimations de flux ne dépend pas du découpage en intervalles de temps.

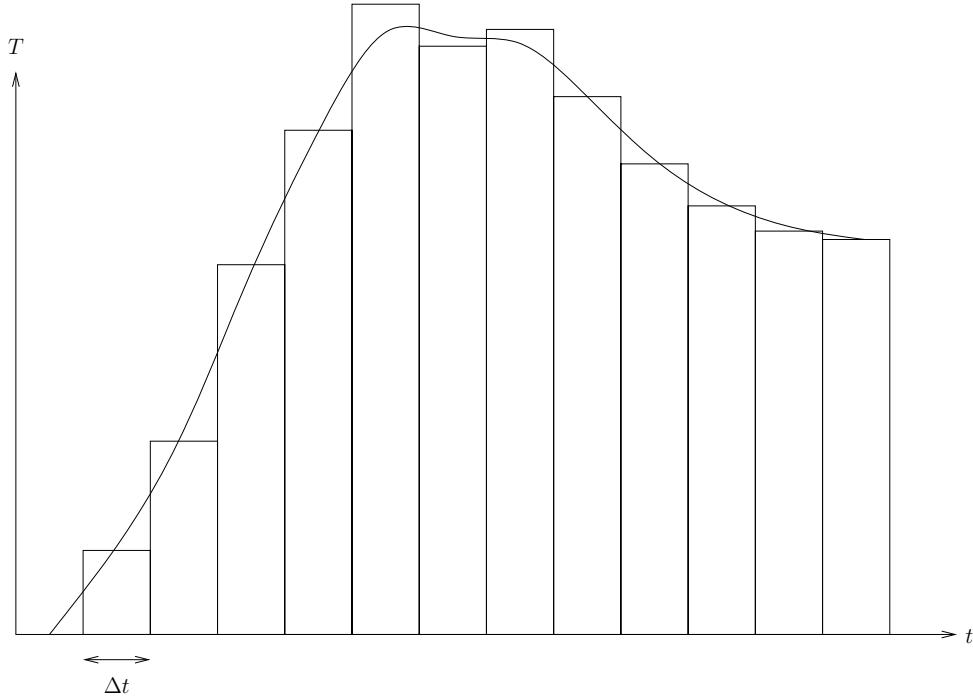


FIG. 4.11 – Les algorithmes de Monte-Carlo directs permettent de construire des histogrammes dans des cas de calculs instationnaires. De ces histogrammes, on déduit alors une courbe de l'évolution temporelle d'un signal radiatif.

Cas d'un algorithme de Monte-Carlo inverse Les algorithmes de Monte-Carlo inverses décrivent le trajet optique de photons (ou de paquets de photons) dans leur sens inverse. Par exemple, dans des problèmes de type source-détecteur, ces algorithmes consistent à simuler des trajets optiques depuis le détecteur jusqu'à la source radiative. Nous avons déjà mentionné dans le chapitre 2 que ce type d'algorithme était adapté à des problèmes où le détecteur est de faible dimension comparé à la source de rayonnement. Dans cet exemple, nous nous sommes basés sur les travaux de Lu et Hsu qui ont développé des algorithmes de Monte-Carlo inverse[84, 82, 86, 87, 40]. Dans [84] et [82], ils montrent comment ces algorithmes permettent de calculer avec une meilleure convergence le rayonnement transmis lorsque l'information est souhaitée sur une faible dimension spatiale ou pour un court intervalle de temps voire un instant t précis. Grâce à l'utilisation du même type d'algorithme que celui décrit dans [82], nous allons pouvoir estimer la transmittance temporelle $T(t)$ à un instant t défini et estimer aussi la sensibilité de la transmittance à t .

Pour décrire cet algorithme inverse, nous commençons par exprimer sous forme intégrale $T(t)$ (expression déduite de l'ETR sous forme intégrale) :

$$\begin{aligned} T(t) &= \frac{1}{I_0} \left\{ I(t_0) e^{-k_e} + \int_{2\pi} (\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}) d\mathbf{u}_d \int_0^{d_0} k_d e^{-k\sigma_1} d\sigma_1 \left\{ I(t_1) e^{-kz_1} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_s \rightarrow \mathbf{u}_d) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) d\mathbf{u}_1 \int_0^{d_1} k_d e^{-k\sigma_2} d\sigma_2 \left\{ I(t_2) e^{-kz_2} \Phi(\mathbf{r}_2; \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) + \dots \right. \right. \right. \right. \end{aligned} \tag{4.2.2}$$

où $k = k_a + k_d$ est le coefficient d'extinction et Φ la fonction de phase. Les notations utilisées dans cette équation sont représentées sur la figure 4.12. $T(t)$ est une intégrale sur l'espace des

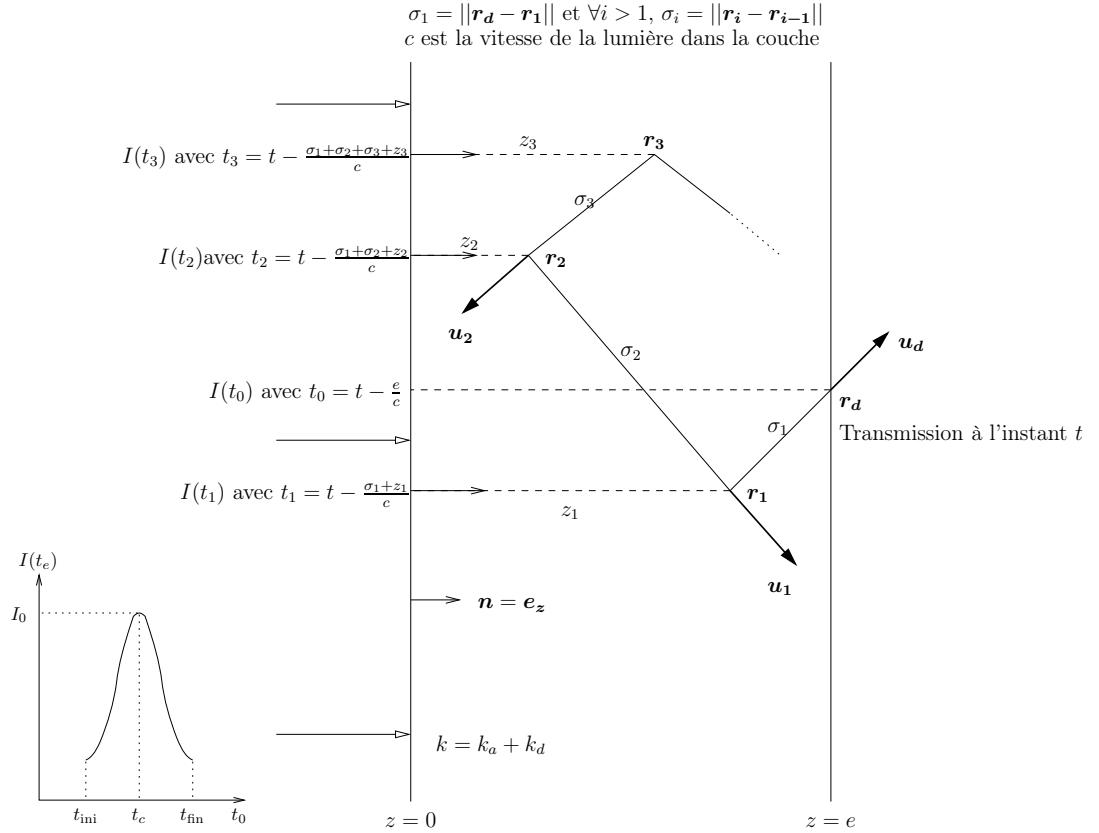


FIG. 4.12 – Description des notations utilisées pour exprimer sous forme intégrale 4.2.2 et pour décrire l'algorithme de Monte-Carlo inverse

chemins optiques émis dans la direction $\mathbf{u}_S = \mathbf{e}_z$ par la source et transmis à l'instant t en un point \mathbf{r}_d . $T(t)$ est une somme dont chacun des termes représente la contribution d'un ensemble de chemins optiques avec un même nombre de diffusion. Par exemple,

$$\frac{1}{I_0} I(t_0) e^{-ke} \quad (4.2.3)$$

représente la contribution du chemin optique transmis en \mathbf{r}_d à l'instant t sans subir de diffusion. L'instant $t_0 = t - \frac{e}{c}$ d'émission de ce chemin optique est calculé en fonction de l'instant t de transmission et de la longueur du chemin optique (égale à e , l'épaisseur de la couche). Le terme

$$\frac{1}{I_0} \int_{2\pi} (\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}) d\mathbf{u}_d \int_0^{d_0} k_d e^{-k\sigma_1} d\sigma_1 I(t_1) e^{-kz_1} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_d) \quad (4.2.4)$$

représente la contribution de l'ensemble des chemins optiques émis dans la direction \mathbf{u}_S et transmis à l'instant t en \mathbf{r}_d après avoir subi une diffusion (en \mathbf{r}_1). Comme précédemment, l'instant $t_1 = t - \frac{\sigma_1 + z_1}{c}$ d'émission de ces trajets optiques est calculé en fonction de t et de la longueur du chemin optique considéré (égale à $\sigma_1 + z_1$, z_1 étant l'abscisse selon \mathbf{e}_z du point \mathbf{r}_1 et $\sigma_1 = \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_d\|$). $d_0 = \frac{e}{\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{e}_z}$ est la distance maximale que peut parcourir (en sens inverse) ces trajets optiques avant de sortir de la couche sans diffusion (d'une manière générale, la distance $d_i \forall i$ est la distance maximale entre le point de diffusion et la sortie de la couche).

L'algorithme de Monte-Carlo décrit dans [82] peut se déduire de l'expression 4.2.2. Il consiste à générer un chemin optique (sens inverse), avec les tirages aléatoires successifs des directions et

des positions $(\mathbf{u}_d, \mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$. A chaque nouvelle positions de diffusion \mathbf{r}_i , on tient compte de la fraction d'énergie transmise depuis la source le long du chemin optique défini par les directions et les positions successives $(\mathbf{u}_S, \mathbf{r}_i, \mathbf{u}_{i-1}, \mathbf{r}_{i-1}, \dots, \mathbf{r}_2, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{u}_d)$.

La génération aléatoire du chemin optique généré dans son sens inverse $(\mathbf{u}_d, \mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ s'arrête dès que le trajet sort de la couche. Ceci se traduit d'un point de vue formel par l'introduction des fonctions heaviside $H(d_{i-1} - \sigma_i)$ dans l'expression 4.2.2 $\forall i \in \mathbb{N}^+$ on a :

$$\int_0^{d_{i-1}} d\sigma_i = \int_0^{+\infty} H(d_{i-1} - \sigma_i) d\sigma_i$$

$T(t)$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} T(t) &= \frac{1}{I_0} \left\{ I(t_0) e^{-ke} + \int_{2\pi} (\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}) d\mathbf{u}_d \int_0^{+\infty} H(d_0 - \sigma_1) k_d e^{-k\sigma_1} d\sigma_1 \left\{ I(t_1) e^{-kz_1} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_d) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} H(d_1 - \sigma_2) k_d e^{-k\sigma_2} d\sigma_2 \left\{ I(t_2) e^{-kz_2} \Phi(\mathbf{r}_2; \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) + \dots \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \left. \right. \right. \right. \right. \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Les densités de probabilités choisies sont les suivantes :

$$\begin{aligned} p_{U_d}(\mathbf{u}_d) &= \frac{\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}}{\pi} \\ \forall i \in \mathbb{N}^+ \quad p_{U_i}(\mathbf{u}_i) &= \Phi(\mathbf{r}_i; \mathbf{u}_i \rightarrow \mathbf{u}_{i-1}) \\ p_{\Sigma_i}(\sigma_i) &= k_d e^{-k_d \sigma_i} \end{aligned}$$

\mathbf{u}_d est générée selon la loi de Lambert, \mathbf{u}_i selon la fonction de phase et les positions de diffusion selon la loi de Beer-Lambert. On introduit ces densités de probabilités dans l'expression de $T(t)$ et on obtient :

$$T(t) = \int_{2\pi} p_{U_d}(\mathbf{u}_d) d\mathbf{u}_d \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) \dots w(\mathbf{u}_d, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) \quad (4.2.6)$$

où $w(\mathbf{u}_d, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots)$ est la fonction poids égale à :

$$\begin{aligned} w(\mathbf{u}_d, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) &= \frac{1}{I_0} \left\{ I(t_0) e^{-ke} + \pi H(d_0 - \sigma_1) e^{-k_a \sigma_1} \left\{ I(t_1) e^{-kz_1} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_d) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. H(d_1 - \sigma_2) e^{-k_a \sigma_2} \left\{ I(t_2) e^{-kz_2} \Phi(\mathbf{r}_2; \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) + \dots \right. \right. \right\} \right\} \quad (4.2.7) \end{aligned}$$

Cet algorithme de Monte-Carlo est décrit sur la figure 4.13.

Remarque La génération aléatoire du chemin optique dans son sens inverse $(\mathbf{u}_d, \mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ s'arrête dès que ce trajet sort de la couche ou dès que la distance parcourue $\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_d\| + \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\| + \dots$ par ce chemin optique est supérieure à $c(t - t_{\text{ini}})$, c'est-à-dire à partir du moment où les instants $t_i |_{\{i \in \mathbb{N}^+\}}$ deviennent antérieur à t_{ini} (à ce moment là, la source n'émet pas encore de signal radiatif).

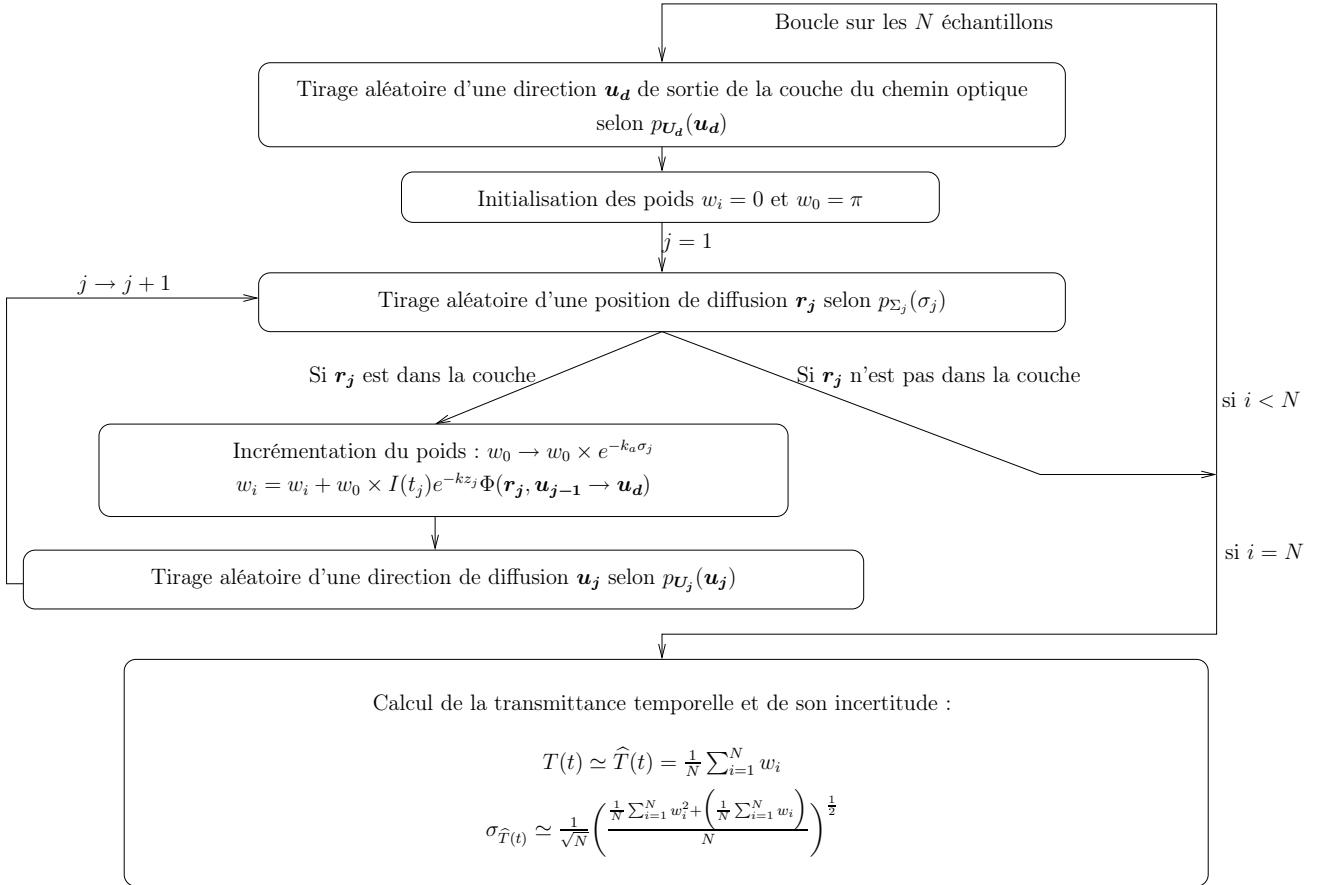


FIG. 4.13 – Algorithme de Monte-Carlo inverse dans un problème instationnaire.

4.2.2 Calcul de la sensibilité à t de $T(t)$ avec l'algorithme inverse

Le domaine d'intégration de $T(t)$ dans l'expression 4.2.6 est indépendant de t . $\partial_t T$ est donc une sensibilité paramétrique égale à⁵

$$\partial_t T(t) = \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_d}(\mathbf{u}_d) d\mathbf{u}_d \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) \dots w_t(\mathbf{u}_d, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) \quad (4.2.8)$$

où $w_t(\mathbf{u}_d, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots)$ est la fonction poids associée au calcul de la sensibilité à t . Les densités de probabilité étant indépendantes de t , on a $w_t = \partial_t w$. Seul les termes $I(t_i)$ ($\forall i \in \mathbb{N}$) dans l'expression de w (équation 4.2.7) sont dépendants du temps à travers $t_i = t - \frac{\sigma_1 + \dots + \sigma_i + z_i}{c}$. On en déduit que seule une dérivée de l'expression de $I(t_e)$ (équation 4.2.1) par rapport au temps suffit à l'estimation de la sensibilité :

$$w_t(\mathbf{u}_d, \sigma_1, \mathbf{u}_1, \sigma_2, \dots) = \frac{1}{I_0} \left\{ \partial_t [I(t_0)] e^{-ke} + \pi H(d_0 - \sigma_1) e^{-k_a \sigma_1} \left\{ \partial_t [I(t_1)] e^{-kz_1} \Phi(\mathbf{r}_1; \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_d) + H(d_1 - \sigma_2) e^{-k_a \sigma_2} \left\{ \partial_t [I(t_2)] e^{-kz_2} \Phi(\mathbf{r}_2; \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) + \dots \right\} \right\} \right\} \quad (4.2.9)$$

⁵Nous appliquons ici les principes du calcul de sensibilité paramétrique présenté au chapitre précédent, paragraphe 3.1.1

4.2.3 Résultats

La figure 4.14 présente un exemple de résultats dans le cas d'une épaisseur optique $\tau (= ke) = 5$ et d'un albédo $\omega = 0.5$. Le temps est adimensionné : $t^* = c \times k \times t$, $t_p^* = c \times k \times t_p$ (cf équation 4.2.1). La figure 4.15 donne les estimations des écart-types correspondants. Les incertitudes

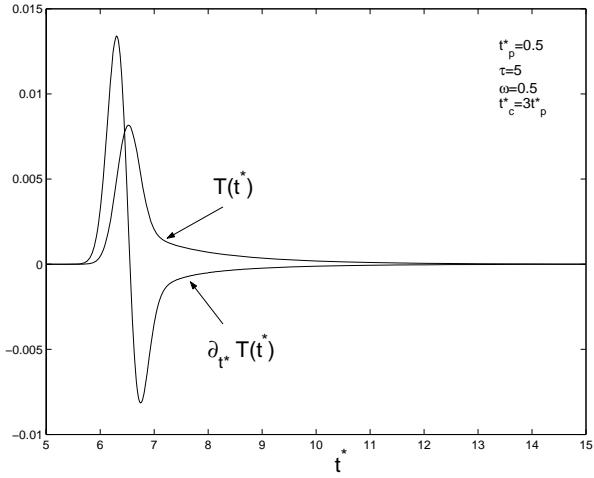


FIG. 4.14 – Estimations de $T(t^*)$ et de sa sensibilité au temps $\partial_t T(t^*)$.

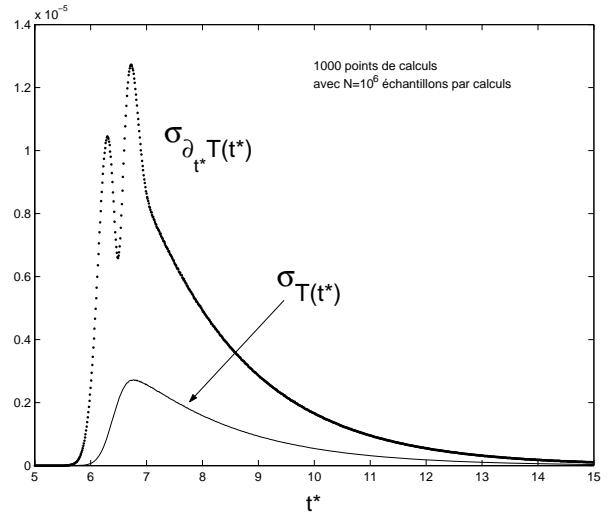


FIG. 4.15 – Écart-type sur l'estimation de $T(t^*)$ et de sa sensibilité $\partial_t T(t^*)$

relatives obtenues lors du calcul de la sensibilité sont supérieures à celles obtenues lors de l'estimation de T mais restent du même ordre de grandeur. Le pourcentage de temps de calcul supplémentaire dû à l'estimation de la sensibilité est de 3.5%, soit un temps supplémentaire très faible puisque très peu de calculs (une simple dérivée de l'intensité) sont nécessaires pour ajouter l'estimation de la sensibilité.

Cet exemple montre donc comment il est possible d'ajouter, pour un temps supplémentaire très faible, le calcul des sensibilités temporelles d'un signal radiatif instationnaire. Il est important de souligner que les incertitudes associées à cette estimation de sensibilités sont nettement inférieures à celles qui résulteraient d'une méthode standard de différentiation numérique (voir les résultats dans les paragraphes 3.3.1 et 3.3.2 du chapitre précédent) telle que celle utilisée dans [66, 68].

A travers cet exemple, nous avons illustré les avantages, pour l'estimation d'une sensibilité temporelle, de l'utilisation des algorithmes inverses par rapport aux algorithmes directs. Cependant, l'exemple traité est particulièrement bien adapté à ce type d'algorithme puisque nous avons considéré une source de rayonnement très large. Si cette source était de faible dimension, cet algorithme inverse de calcul connaîtrait des difficultés de convergence. De même, si le détecteur était de faible dimension, ce sont les algorithmes de Monte-Carlo directs qui seraient inadaptés. Nous nous intéressons à ce type de difficultés dans le paragraphe suivant.

4.3 Problèmes de type source-détecteur

De nombreuses problématiques en imagerie optique concernent l'étude de la propagation des transferts radiatifs depuis une source radiative jusqu'à un détecteur. Nous avons vu dans le

paragraphe précédent que ces études étaient souvent motivées par la volonté de caractériser les propriétés optiques du milieu de propagation[65], et nous nous sommes intéressés aux questions spécifiques associées au traitement de l'instationnarité des transferts radiatifs. Dans ce nouvel exemple, nous allons aborder les difficultés posées par la simulation numérique par MMC de la transmission du rayonnement depuis une source jusqu'à un détecteur, notamment quand cette source et ce détecteur ont de faibles dimensions ou lorsque le rayonnement émis ou détecté est directionnel. Nous appellerons ces difficultés des problèmes du type source-détecteur.

L'utilisation de la méthode de Monte-Carlo dans ces problèmes est réputée délicate si la source et le détecteur sont de petites tailles : l'approche analogue directe est inefficace si le détecteur est de faible dimension car peu de photons émis par la source atteignent ce détecteur. Des algorithmes de Monte-Carlo inverses, basés sur une approche analogue, permettent de traiter les cas où le détecteur est directionnel et/ou de faible dimension[31, 39, 40]. Cependant, ces approches inverses ne sont valables que lorsque la source radiative est de dimension suffisamment importante (comme dans l'exemple présenté au paragraphe précédent). Si la source est de petite taille, la difficulté reste la même (cf la figure 4.16). De même, lorsque la source émet

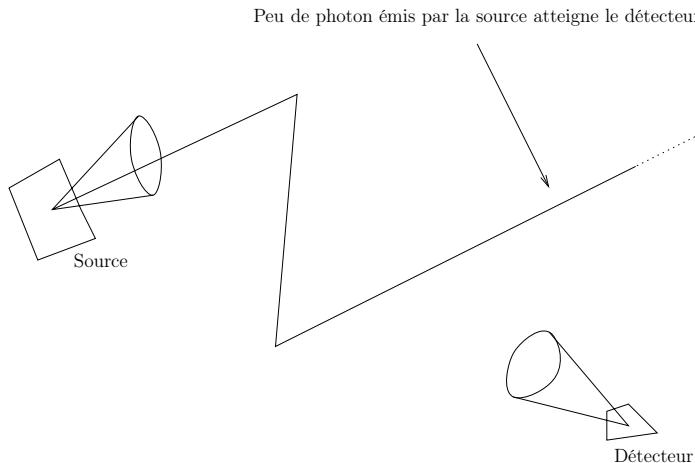


FIG. 4.16 – Illustration des difficultés posées par les problèmes de type source-détecteur lors de l'utilisation d'un algorithme analogue

dans une direction unique et que le détecteur ne capte que le rayonnement provenant d'une direction unique ou d'un angle solide très faible, les algorithmes analogues divergent. Ainsi, si on s'intéresse aux cas limites où la source est ponctuelle et/ou directionnelle, et le détecteur est également ponctuel et/ou directionnel, la variance d'un algorithme de Monte-Carlo analogue tend vers l'infini.

Pour illustrer ceci, nous avons testé un algorithme analogue⁶ sur un problème de type source-détecteur (la configuration géométrique choisie est présenté sur la figure 4.17). Sur la courbe 4.18, sont donnés le nombre d'échantillons N nécessaires pour avoir une incertitude relative de 5% en fonction du rayon du détecteur R_d . Lorsque celui-ci tend vers 0, le détecteur devient quasi-ponctuel et en conséquence l'algorithme analogue diverge ($N \rightarrow +\infty$).

D'un point de vue formel, nous avons vu précédemment⁷ que l'écriture intégrale associée à un algorithme analogue nécessitait l'introduction de fonctions échelons. Dans les cas où la

⁶Cet algorithme analogue est décrit sur la figure B.1 donnée en annexe B

⁷cf paragraphes 3.3.2 du chapitre 3 et 2.2.3 du chapitre 2

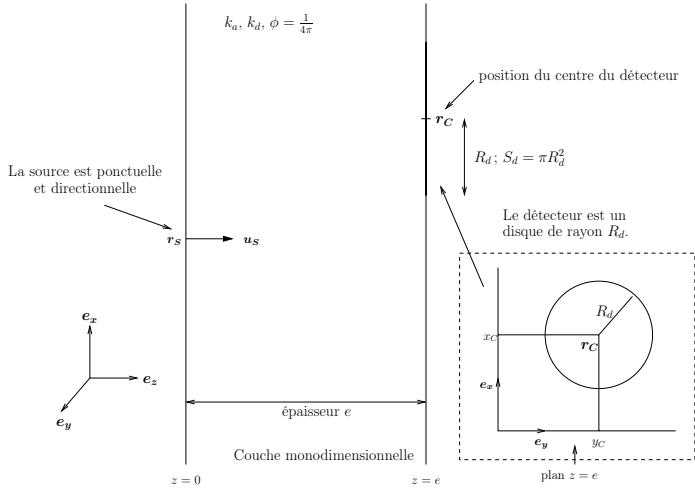


FIG. 4.17 – Description du système sur lequel nous avons testé un algorithme analogue. La source est localisé au point \mathbf{r}_S de coordonnées $(x_S, y_S, 0)$ (dans le repère $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$) et émet une puissance P_S dans la direction \mathbf{u}_S . Le détecteur est un disque de centre $\mathbf{r}_C(x_C, y_C, e)$ où e est l'épaisseur de la couche monodimensionnelle (composée d'un milieu absorbant et diffusant) dans laquelle se propage le rayonnement.

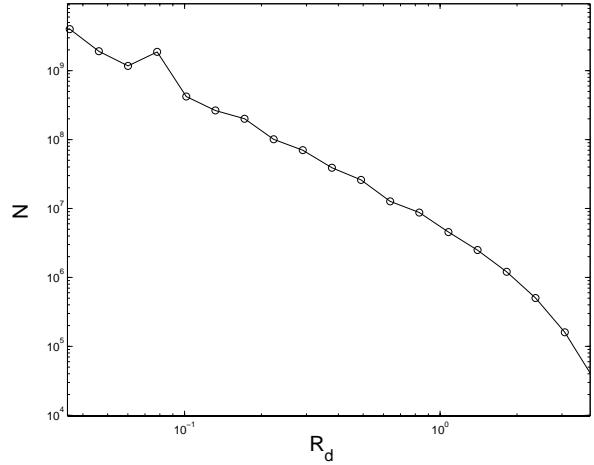


FIG. 4.18 – Tracé de $N(R_d)$; la configuration paramétrique est la suivante $k_a = k_d = 1, e = 1, \mathbf{r}_S = (0, 0, 0), \mathbf{r}_d(5, 0, e)$ (tous ces paramètres sont décrits sur la figure 4.17). N est le nombre d'échantillons nécessaire pour obtenir une incertitude relative de 5% : $N \rightarrow +\infty$ lorsque le rayon $R_d \rightarrow 0$.

source et le détecteur sont quasi-ponctuels et/ou quasi-directionnels, les fonctions combinaisons de fonctions échelons traduisant les conditions pour qu'un trajet optique atteigne le détecteur vont tendre vers une distribution de Dirac, incompatible avec un algorithme de Monte-Carlo.

Néanmoins la formulation intégrale de la transmission d'un signal radiatif depuis une source jusqu'à un détecteur existe, nous allons donc essayer de la définir dans le paragraphe qui suit.

4.3.1 Formulation intégrale de la transmission d'un signal radiatif depuis une source jusqu'à un détecteur

Si on considère une source de surface S qui émet un flux F_S dans un angle solide Ω_S et un capteur de surface S_d détectant le rayonnement provenant d'un angle solide Ω_d , le flux d'énergie radiative F émis par la source, transmis à travers un milieu diffusant et absorbant et capté par

le détecteur s'écrit[88] :

$$\begin{aligned}
 F = & \frac{F_S}{\pi S} \int_S d\mathbf{r}_S \int_{\Omega_S} d\mathbf{u}_S (\mathbf{u}_S \cdot \mathbf{n}_S) \int_{S_d} d\mathbf{r}_d \int_{\Omega_d} d\mathbf{u}_d (\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}_d) \int_{\sigma_1} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) e^{-k\sigma_1} k_d \left\{ \right. \\
 & \int_{\tilde{\sigma}_2} d\tilde{\sigma}_2(\tilde{\mathbf{r}}_2) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_1) \frac{e^{-k||\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1||}}{||\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1||^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_2, \tilde{\mathbf{u}}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) e^{-k||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_2||} \\
 & + \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_1) \int_{\sigma_2} d\sigma_2(\mathbf{r}_2) e^{-k||\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1||} k_d \left\{ \right. \\
 & \int_{\tilde{\sigma}_3} d\tilde{\sigma}_3(\tilde{\mathbf{r}}_3) \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_1 \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_2) \frac{e^{-k||\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2||}}{||\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2||^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_3, \tilde{\mathbf{u}}_2 \rightarrow \mathbf{u}_d) e^{-k||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_3||} \\
 & + \int_{4\pi} d\mathbf{u}_2 \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_1 \rightarrow \mathbf{u}_2) \int_{\sigma_3} d\sigma_3(\mathbf{r}_3) e^{-k||\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2||} k_d \left\{ \dots \right\} \left. \right\} \quad (4.3.1)
 \end{aligned}$$

où \mathbf{n}_S est la normale sortante au point \mathbf{r}_S de la source et \mathbf{n}_d la normale entrante au point \mathbf{r}_d du détecteur ; $k = k_a + k_d$ est le coefficient d'extinction homogène du milieu de propagation (k_a et k_d sont les coefficients d'absorption et de diffusion) et Φ la fonction de phase. $\forall i$, $\sigma_i = ||\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}||$ et $\tilde{\sigma}_i = ||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_i||$ sont des abscisses curvilignes repérant les positions de diffusions \mathbf{r}_i et $\tilde{\mathbf{r}}_i$. Les notations utilisées dans cette équation sont illustrées sur la figure 4.19. L'expression 4.3.1 est

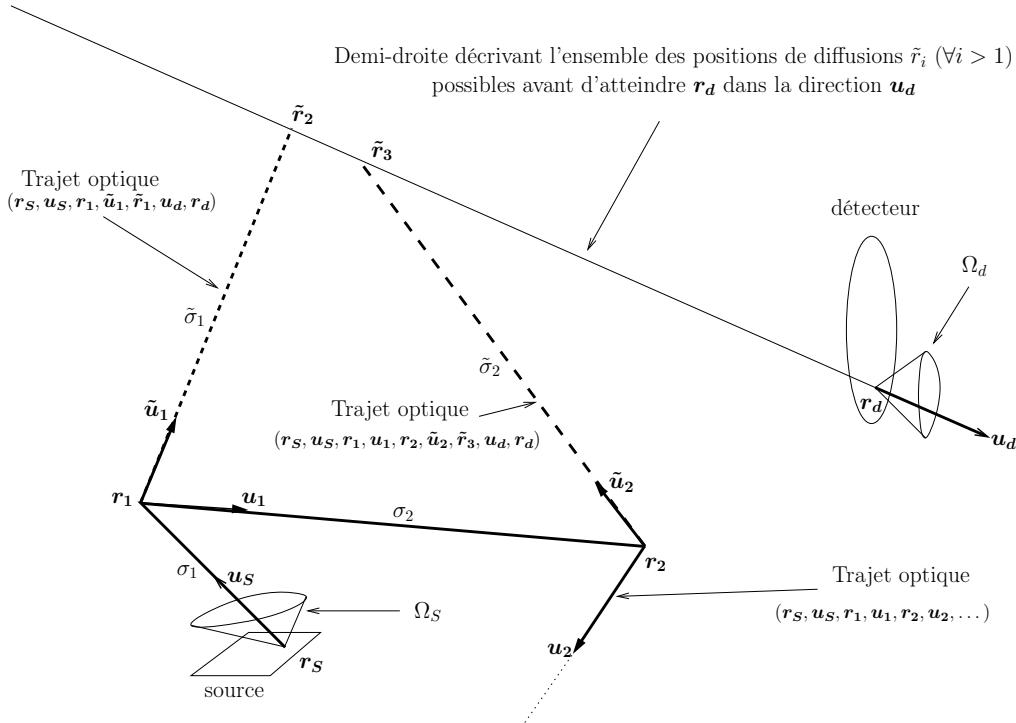


FIG. 4.19 – Chemin optique illustrant les notations utilisées dans l'équation 4.3.1.

une intégrale sur l'espace des chemins optiques $\Gamma([S, \Omega_S] \rightarrow [S_d, \Omega_d])$, représentant l'ensemble des trajets optiques émis par la source dans l'angle solide Ω_S et transmis jusqu'au détecteur S_d dans la direction Ω_d . $\mathbf{r}_i|_{\{i=1, \dots\}}$ est la position de la i ème diffusion d'un trajet optique ayant plus de i diffusions. $\mathbf{u}_i|_{\{i=1, \dots\}}$ est la direction de cette i ème diffusion. $\tilde{\mathbf{r}}_i|_{\{i=2, \dots\}}$ est la position de la i ème et dernière diffusion avant d'atteindre le détecteur pour un chemin optique à i diffusions. $\tilde{\mathbf{u}}_i|_{\{i=1, \dots\}}$ est la direction de la i ème diffusion pour un chemin optique à $i+1$ diffusions, joignant

les positions \mathbf{r}_i et $\tilde{\mathbf{r}}_{i+1}$: $\tilde{\mathbf{u}}_i = \frac{\tilde{\mathbf{r}}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{\|\tilde{\mathbf{r}}_{i+1} - \mathbf{r}_i\|}$. F est une somme de différents termes. Chacun de ces termes représente la contribution d'un ensemble composé de chemins optiques ayant le même nombre de diffusions⁸. Par exemple le terme suivant :

$$\frac{F_S}{\pi S} \int_S d\mathbf{r}_S \int_{\Omega_S} d\mathbf{u}_S (\mathbf{u}_S \cdot \mathbf{n}_S) \int_{S_d} d\mathbf{r}_d \int_{\Omega_d} d\mathbf{u}_d (\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}_d) \int_{\sigma_1} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) e^{-k\sigma_1} k_d \\ \int_{\tilde{\sigma}_2} d\tilde{\sigma}_2(\tilde{\mathbf{r}}_2) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_1)$$

représente la contribution de l'ensemble des chemins optiques à deux diffusions. Ces chemins optiques à deux diffusions sont définis par les positions et directions successives :

$$(\mathbf{r}_S, \mathbf{u}_S, \mathbf{r}_1, \tilde{\mathbf{u}}_1, \tilde{\mathbf{r}}_2, \mathbf{u}_d, \mathbf{r}_d) \quad (4.3.2)$$

Remarque Plaçons-nous maintenant dans le cas limite où le détecteur et la source sont ponctuels et directionnels. L'expression intégrale de la luminance⁹ $L(\mathbf{r}_d, \mathbf{u}_d)$ transmise jusqu'au détecteur (situé en \mathbf{r}_d et ne détectant que le rayonnement avec une direction d'incidence \mathbf{u}_d) est alors très proche de l'équation 4.3.1 puisqu'il suffit simplement de supprimer les intégrales sur S , Ω_S , S_d et Ω_d :

$$L(\mathbf{r}_d, \mathbf{u}_d) = P_S \int_{\sigma_1} d\sigma_1(\mathbf{r}_1) e^{-k\sigma_1} k_d \left\{ \begin{array}{l} \int_{\tilde{\sigma}_2} d\tilde{\sigma}_2(\tilde{\mathbf{r}}_2) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_1) \frac{e^{-k\|\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1\|}}{\|\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1\|^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_2, \tilde{\mathbf{u}}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) e^{-k\|\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_2\|} \\ + \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_1) \int_{\sigma_2} d\sigma_2(\mathbf{r}_2) e^{-k\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|} k_d \left\{ \begin{array}{l} \int_{\tilde{\sigma}_3} d\tilde{\sigma}_3(\tilde{\mathbf{r}}_3) \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_1 \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_2) \frac{e^{-k\|\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2\|}}{\|\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2\|^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_3, \tilde{\mathbf{u}}_2 \rightarrow \mathbf{u}_d) e^{-k\|\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_3\|} \\ + \dots \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.3.3)$$

où P_S est la puissance radiative émise dans la direction \mathbf{u}_S par la source situé au point \mathbf{r}_S .

4.3.2 Algorithme de Monte-Carlo déduit de l'expression 4.3.1

A partir du moment où l'intégrale est posée, il est toujours possible de proposer un algorithme de Monte-Carlo correspondant¹⁰ (sans préjuger de sa pertinence pratique). Nous nous lançons dans cet exercice en développant un algorithme, dit intégral, basé sur l'équation 4.3.1.

⁸Dans l'expression de F , nous n'avons pas considéré les chemins optiques à 0 ou 1 diffusion en supposant que la configuration géométrique rend impossible ces trajets optiques.

⁹En supprimant les intégrations sur la surface et l'angle solide du détecteur, la grandeur caractérisant le rayonnement incident sur le détecteur devient une luminance au lieu d'un flux

¹⁰cf chapitre 2, paragraphe 2.2

Pour cela, commençons par réécrire l'équation 4.3.1 en introduisant les densités de probabilités :

$$\begin{aligned} F = & \frac{F_S}{\pi S} \int_S p_S(\mathbf{r}_S) d\mathbf{r}_S \int_{\Omega_S} p_{U_S}(\mathbf{u}_S) d\mathbf{u}_S \int_{S_d} p_{S_d}(\mathbf{r}_d) d\mathbf{r}_d \int_{\Omega_d} p_{U_d}(\mathbf{u}_d) d\mathbf{u}_d \\ & \int_{\sigma_1} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1(\mathbf{r}_1) \int_{\tilde{\sigma}_2} p_{\tilde{\Sigma}_2}(\tilde{\sigma}_2) d\tilde{\sigma}_2(\tilde{\mathbf{r}}_2) \int_{4\pi} p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_{\sigma_2} p_{\Sigma_2}(\sigma_2) d\sigma_2(\mathbf{r}_2) \\ & \int_{\tilde{\sigma}_3} p_{\tilde{\Sigma}_3}(\tilde{\sigma}_3) d\tilde{\sigma}_3(\tilde{\mathbf{r}}_3) \dots w(\mathbf{r}_S, \mathbf{u}_S, \mathbf{r}_d, \mathbf{u}_d, \sigma_1, \tilde{\sigma}_2, \mathbf{u}_1, \dots) \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

où la fonction poids w est égale à

$$\begin{aligned} w = & \frac{\mathbf{u}_S \cdot \mathbf{n}_S}{p_S(\mathbf{r}_S) p_{U_S}(\mathbf{u}_S)} \frac{\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}_d}{p_{S_d}(\mathbf{r}_d) p_{U_d}(\mathbf{u}_d)} \frac{e^{-k\sigma_1} k_d}{p_{\Sigma_1}(\sigma_1)} \left\{ \right. \\ & \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_1) \frac{e^{-k||\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1||}}{||\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1||^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_2, \tilde{\mathbf{u}}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) \frac{e^{-k||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_2||}}{p_{\tilde{\Sigma}_2}(\tilde{\sigma}_2)} \\ & + \frac{\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_1)}{p_{U_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1} \frac{e^{-k||\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1||} k_d}{p_{\Sigma_2}(\sigma_2)} \left\{ \right. \\ & \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_1 \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_2) \frac{e^{-k||\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2||}}{||\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2||^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_3, \tilde{\mathbf{u}}_2 \rightarrow \mathbf{u}_d) \frac{e^{-k||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_3||}}{p_{\tilde{\Sigma}_3}(\tilde{\sigma}_3)} \\ & \left. + \dots \right\} \left. \right\} \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

L'algorithme déduit de cette expression consiste à générer aléatoirement un chemin optique défini par les positions et les directions : $(\mathbf{r}_S, \mathbf{u}_S, \mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{u}_2, \dots)$. Pour chaque nouvelle position \mathbf{r}_i , on génère aléatoirement une position $\tilde{\mathbf{r}}_{i+1}$ sur la demi-droite selon $-\mathbf{u}_d$ et ayant pour origine le point $\mathbf{r}_d \in S_d$ (voir la figure 4.19). Ce dernier tirage aléatoire de $\tilde{\mathbf{r}}_{i+1}$ nous permet de tenir compte pour chaque nouvelle position de diffusion \mathbf{r}_i de la luminance transmise depuis \mathbf{r}_i jusqu'à $\tilde{\mathbf{r}}_{i+1}$, diffusée en $\tilde{\mathbf{r}}_{i+1}$ et transmise jusqu'à \mathbf{r}_d dans la direction \mathbf{u}_d .

La génération aléatoire du chemin optique $(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{u}_2, \dots)$ s'arrête dès que le chemin optique sort du système (de manière similaire à l'algorithme inverse présenté dans le paragraphe précédent). D'un point de vue formel, cela se traduit par l'introduction des fonctions heaviside $H(d_i - \sigma_i)$ dans l'expression 4.3.5 où on introduit d_i qui est la valeur maximale que peut prendre σ_i avant que le chemin optique ne sorte du système¹¹ Le sous-domaine d'intégration des variables $\sigma_i, \forall i$, est maintenant $[0, +\infty[$ (au lieu de $[0, d_i]$ auparavant). La fonction $H(d_i - \sigma_i)$ s'annule

¹¹Ces fonctions heavisides ne sont pas liées aux tailles ou aux propriétés directionnelles de la source et du détecteur. Elles ne tendront pas vers une fonction Dirac dans les cas limites où la source et le détecteurs sont ponctuels et/ou directionnels.

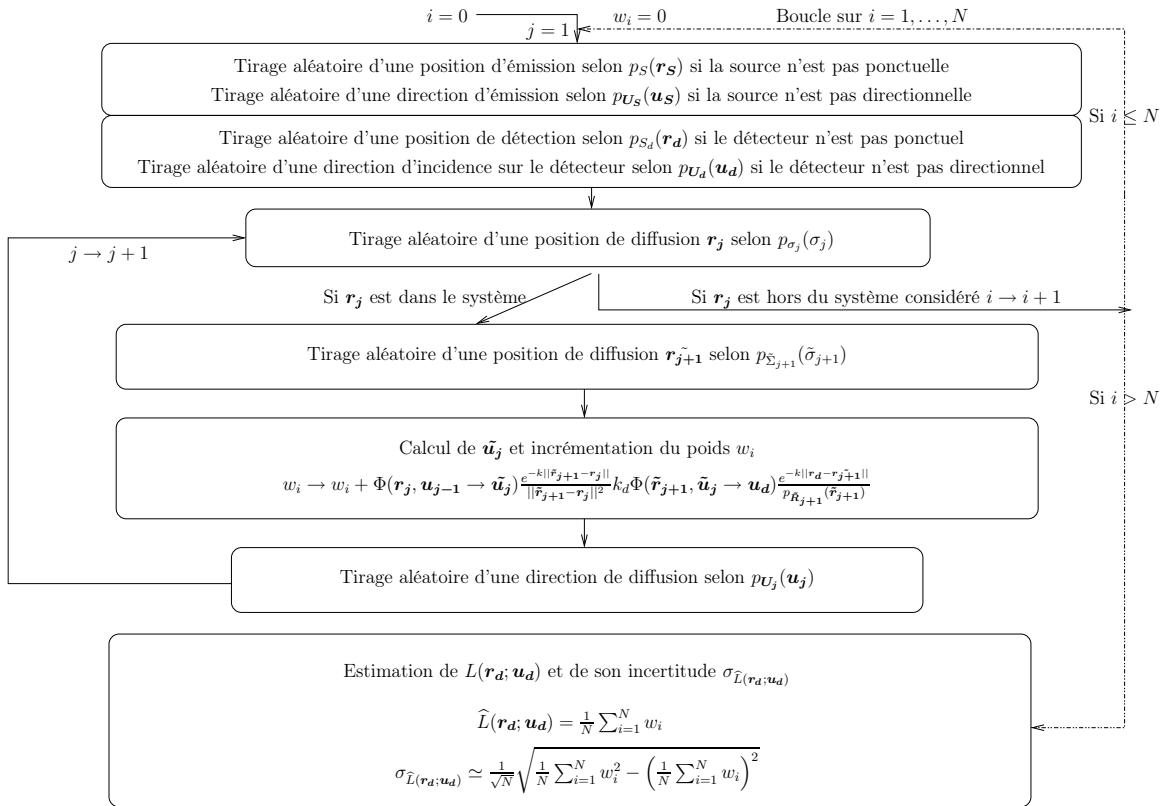


FIG. 4.20 – Algorithme intégral permettant d'estimer le flux radiatif échangé entre une source et un détecteur.

si la position \mathbf{r}_i est hors du système considéré. Le poids w s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 w = & \frac{\mathbf{u}_S \cdot \mathbf{n}_S}{p_S(\mathbf{r}_S)p_{U_S}(\mathbf{u}_S)} \frac{\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}_d}{p_{S_d}(\mathbf{r}_d)p_{U_d}(\mathbf{u}_d)} \frac{e^{-k\sigma_1} k_d}{p_{\Sigma_1}(\sigma_1)} H(d_1 - \sigma_1) \Bigg\{ \\
 & \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_1) \frac{e^{-k||\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1||}}{||\tilde{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{r}_1||^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_2, \tilde{\mathbf{u}}_1 \rightarrow \mathbf{u}_d) \frac{e^{-k||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_2||}}{p_{\tilde{\Sigma}_2}(\tilde{\sigma}_2)} \\
 & + \frac{\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_1) e^{-k||\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1||} k_d}{p_{U_1}(\mathbf{u}_1)d\mathbf{u}_1} H(d_2 - \sigma_2) \Bigg\{ \\
 & \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_1 \rightarrow \tilde{\mathbf{u}}_2) \frac{e^{-k||\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2||}}{||\tilde{\mathbf{r}}_3 - \mathbf{r}_2||^2} k_d \Phi(\tilde{\mathbf{r}}_3, \tilde{\mathbf{u}}_2 \rightarrow \mathbf{u}_d) \frac{e^{-k||\mathbf{r}_d - \tilde{\mathbf{r}}_3||}}{p_{\tilde{\Sigma}_3}(\tilde{\sigma}_3)} \\
 & + \dots \Bigg\} \Bigg\} \quad (4.3.6)
 \end{aligned}$$

Les densités de probabilité que nous choisissons correspondent à la loi de Lambert, à la loi de Beer et à la fonction de phase. C'est-à-dire $\forall i \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned}
 p_{U_1}(\mathbf{u}_1) &= \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}_1) \\
 p_{\Sigma_i}(\sigma_i) &= k_d e^{-k_d \sigma_i} \\
 p_{U_i}(\mathbf{u}_i) &= \Phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{u}_{i-1} \rightarrow \mathbf{u}_i) \quad (4.3.7)
 \end{aligned}$$

Nous retenons également la loi de Beer pour la densité de probabilité $p_{\tilde{\Sigma}_i}(\tilde{\sigma}_i)$:

$$p_{\tilde{\Sigma}_i}(\tilde{\sigma}_i) = \frac{k_d e^{-k_d \tilde{\sigma}_i}}{1 - e^{-k_d \tilde{\sigma}_i}} \quad (4.3.8)$$

où \tilde{d} est la valeur maximale que peut prendre $\forall i \tilde{\sigma}_i$ (\tilde{d} dépend de la géométrie du système). Cet algorithme est représenté sur la figure 4.20.

Remarque : cas limites où la source et le détecteur sont ponctuels et/ou directionnels Cet algorithme intégral déduit de l'expression 4.3.1 peut aussi s'appliquer aux cas limites où la source et le détecteur sont ponctuels et/ou directionnels. Par exemple, si la source est ponctuelle et directionnelle, il suffit simplement de ne plus générer aléatoirement de positions et de directions d'émissions (pareil pour le détecteur). Que les variances obtenues par cet algorithme soient satisfaisantes ou non, on peut d'ores et déjà conclure qu'il est possible de quantifier l'échange entre une source et un détecteur ponctuels et directionnels avec la méthode de Monte-Carlo, contrairement à ce que pouvait laisser supposer une approche analogue de la méthode.

4.3.3 Exemples

Comparaison avec un algorithme analogue

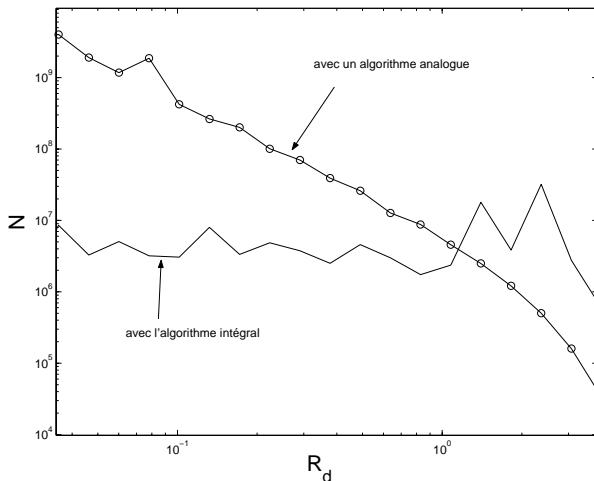


FIG. 4.21 – Tracé de $N(R_d)$ avec un algorithme analogue et avec l'algorithme intégral. N est le nombre d'échantillons nécessaires pour avoir une incertitude relative de 5% ; la configuration paramétrique est la suivante $k_a = k_d = 1$, $e = 1$, $\mathbf{r}_S = (0, 0, 0)$, $\mathbf{r}_d(5, 0, e)$ (tous ces paramètres sont représentés sur la figure 4.17).

Nous avons effectué avec cet algorithme intégral le même test qu'avec l'algorithme analogue précédent (voir la figure 4.17 où cet exemple est représenté). Sur la figure 4.21, nous avons tracé le nombre d'échantillons N nécessaires avec l'algorithme intégral et avec l'algorithme analogue pour avoir une incertitude relative de 5% en fonction du rayon du détecteur R_d . Lorsque le rayon du détecteur tend vers 0 (le détecteur devient quasi-ponctuel), on obtient avec l'algorithme intégral des incertitudes relatives qui n'augmentent pas (tandis que l'algorithme analogue diverge). Ceci montre que cet algorithme intégral peut fonctionner dans des cas où les algorithmes analogues divergent complètement.

Cas limite où la source et le détecteur sont ponctuels et directionnels

Nous présentons maintenant quelques tests nous permettant d'évaluer le comportement de l'algorithme intégral dans différentes configurations physiques et géométriques. Nous commen-

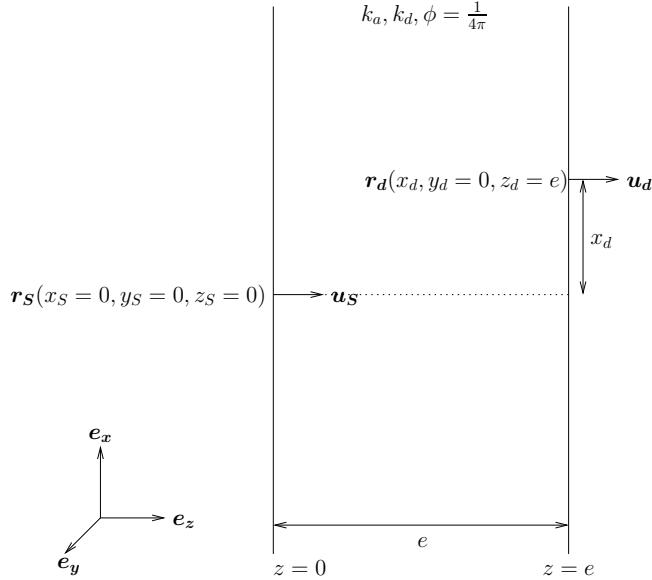


FIG. 4.22 – Description de l'exemple où la source et le détecteur sont ponctuels et directionnels

çons par l'exemple réputé inaccessible : le cas extrême d'une source et d'un détecteur tous les deux ponctuels et directionnels. On note $L = L(\mathbf{r}_d, \mathbf{u}_d)$ (en $W.m^{-2}.str^{-1}$) la luminance incidente sur le détecteur \mathbf{r}_d dans la direction \mathbf{u}_d . La source est située au point \mathbf{r}_s et émet une puissance P_S dans la direction \mathbf{u}_s perpendiculaire à la face d'une couche monodimensionnelle composée d'un milieu absorbant et diffusant (cf figure 4.22). Le détecteur est placé sur l'autre face de la couche au point \mathbf{r}_d et capte le rayonnement ayant comme direction d'incidence \mathbf{u}_d . Le tableau

e en m	x_d en m	L	σ_L	$\frac{\sigma_L}{L}$	$\partial_{x_d} L$	$\sigma_{\partial_{x_d} L}$	$\frac{\sigma_{\partial_{x_d} L}}{ \partial_{x_d} L }$
0,1	0,5	$9,78.10^{-5}$	$4,31.10^{-7}$	0,440%	$-5,00.10^{-4}$	$6,77.10^{-5}$	13,5%
0,1	2	$3,21.10^{-7}$	$8,21.10^{-9}$	2,56%	$-6,39.10^{-7}$	$1,93.10^{-7}$	30,2%
0,1	10	$1,27.10^{-15}$	$5,96.10^{-18}$	0,469%	$-2,80.10^{-15}$	$1,39.10^{-17}$	0,496%
1	0,5	$1,79.10^{-3}$	$3,33.10^{-6}$	0,186%	$-7,86.10^{-3}$	$4,69.10^{-4}$	5,97%
1	2	$1,65.10^{-5}$	$2,84.10^{-7}$	1,72%	$-7,46.10^{-5}$	$2,79.10^{-5}$	37,4%
1	10	$6,79.10^{-14}$	$2,31.10^{-15}$	3,40%	$-1,52.10^{-13}$	$5,63.10^{-15}$	3,70%
10	0,5	$6,52.10^{-10}$	$4,78.10^{-11}$	7,33%	$-1,08.10^{-9}$	$2,00.10^{-10}$	18,5%
10	2	$1,10.10^{-10}$	$1,71.10^{-11}$	15,5%	$-1,76.10^{-10}$	$6,84.10^{-11}$	38,9%
10	10	$6,30.10^{-16}$	$1,24.10^{-16}$	19,7%	$-1,25.10^{-15}$	$2,82.10^{-16}$	22,6%

TAB. 4.2 – Calcul de l'échange entre une source et un détecteur, ponctuels et directionnels, avec l'estimation simultanée de la sensibilité à la position du détecteur. $N = 10^7$, $k_d = k_a = 1m^{-1}$, $\mathbf{r}_s(0, 0, 0)$, $\mathbf{r}_d(x_d, 0, e)$, $\mathbf{u}_s(\theta_s, \varphi_s) = (0, 0)$, $\mathbf{u}_d(\theta_d, \varphi_d) = (0, 0)$. La diffusion est isotrope $\Phi = \frac{1}{4\pi}$, $P_S = 1W$

4.2 présente des résultats en fonction de e , l'épaisseur de la couche et de x_d (la coordonnée du

détecteur qui peut bouger). On observe sur le tableau (colonne 4 et 5) que la convergence des calculs dépend fortement de l'épaisseur optique. Tant que l'épaisseur optique est faible ou intermédiaire, les incertitudes sont plus ou moins satisfaisantes mais dès que les épaisseurs optiques deviennent importante, l'algorithme diverge. Ceci s'explique par le fait qu'à forte épaisseur optique, $\forall i$, lorsque le point r_i est loin du détecteur (cf figure 4.23), la contribution du trajet optique défini par les positions et directions successives $(r_s, u_s, r_1, \dots, r_i, \tilde{u}_i, \tilde{r}_{i+1}, u_d, r_d)$ est trop faible. Il faudrait alors que le point r_i soit proche du point r_d pour que cette contribution

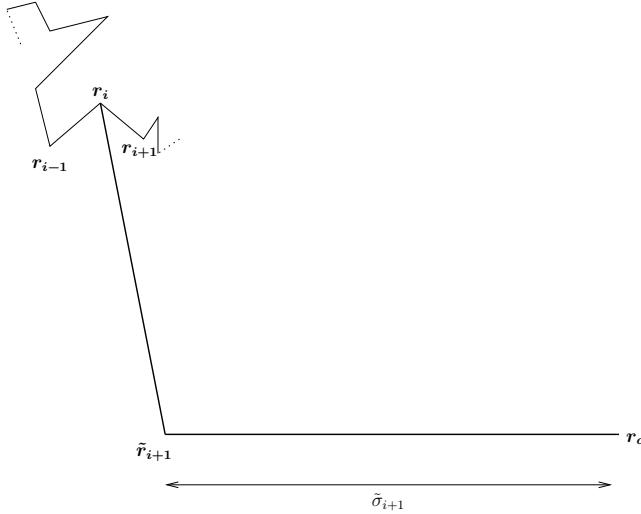


FIG. 4.23 – A forte épaisseur optique, si le point r_i est loin de r_d , la contribution du trajet optique finissant par les positions $r_i, \tilde{r}_{i+1}, r_d$ est quasi-négligeable ce qui augmente la variance sur les estimations de E .

devienne significative. Or justement, plus l'épaisseur optique augmente et moins une position de diffusion r_i a de probabilité de se trouver aux alentours du détecteur r_d . Une solution pour remédier à cette difficulté de convergence dans les épaisseurs optiques épaisses seraient de favoriser l'échantillonnage des trajets optiques se rapprochant du détecteur. En d'autre terme, il faudrait optimiser les phénomènes de diffusion multiple pour balayer intelligemment la distribution des chemins optiques, ce qui est actuellement une question ouverte.

Nous n'avons pas plus approfondi la réflexion sur l'optimisation de cet algorithme. En conclusion, nous retiendrons cependant qu'il est possible, dans certaines configurations physique, de quantifier l'échange radiatif entre une source ponctuelle directionnelle et un détecteur ponctuel directionnel avec cet algorithme intégral.

Cas où la source est ponctuelle et directionnelle, et le détecteur ponctuel

Nous considérons ici la même configuration que dans l'exemple précédent excepté le fait que le détecteur n'est plus directionnel et capte l'énergie à l'intérieur d'un angle solide Ω_d défini par :

$$\Omega_d = \int_0^{2\pi} d\varphi_d \int_0^{\theta_{\lim}} \sin \theta_d d\theta_d = (1 - \cos \theta_{\lim}) \quad (4.3.9)$$

où θ_{\lim} est un angle polaire représenté sur la figure 4.24. Les estimations du flux incident sur

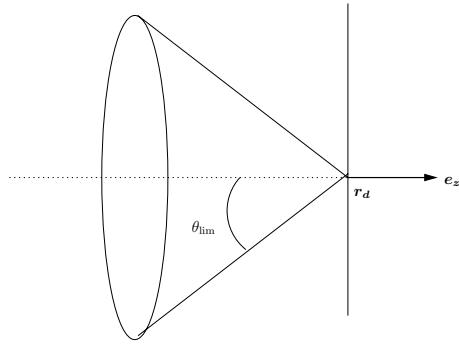


FIG. 4.24 – Description de l'angle solide de détection

le détecteur F (en $W.m^{-2}$), de mêmes que les incertitudes, sont présentés dans le tableau 4.3 en fonction de l'épaisseur e et de l'angle θ_{lim} . Comme précédemment, l'algorithme diverge aux

e en m	θ_{lim}	F	σ_F	$\frac{\sigma_F}{F}$	$\partial_{\theta_{\text{lim}}} F$	$\sigma_{\partial_{\theta_{\text{lim}}} F}$	$\frac{\sigma_{\partial_{\theta_{\text{lim}}} F}}{\partial_{\theta_{\text{lim}}} F}$
0, 1	$\frac{\pi}{200}$	$2,54 \cdot 10^{-10}$	$7,12 \cdot 10^{-12}$	2,80%	$3,23 \cdot 10^{-8}$	$9,07 \cdot 10^{-10}$	2,81%
0, 1	$\frac{\pi}{100}$	$9,87 \cdot 10^{-10}$	$1,63 \cdot 10^{-11}$	1,65%	$6,29 \cdot 10^{-8}$	$1,04 \cdot 10^{-9}$	1,65%
0, 1	$\frac{\pi}{50}$	$3,97 \cdot 10^{-9}$	$8,10 \cdot 10^{-11}$	2,04%	$1,26 \cdot 10^{-7}$	$2,54 \cdot 10^{-9}$	2,01%
0, 1	$\frac{\pi}{10}$	$1,02 \cdot 10^{-7}$	$3,34 \cdot 10^{-9}$	3,27%	$6,29 \cdot 10^{-7}$	$1,44 \cdot 10^{-8}$	2,29%
0, 1	$\frac{\pi}{3}$	$9,71 \cdot 10^{-7}$	$1,88 \cdot 10^{-8}$	1,94%	$1,61 \cdot 10^{-6}$	$3,67 \cdot 10^{-8}$	2,28%
1	$\frac{\pi}{200}$	$1,24 \cdot 10^{-8}$	$9,36 \cdot 10^{-11}$	0,755%	$1,59 \cdot 10^{-6}$	$1,20 \cdot 10^{-8}$	0,755%
1	$\frac{\pi}{100}$	$5,05 \cdot 10^{-8}$	$5,17 \cdot 10^{-10}$	1,02%	$3,22 \cdot 10^{-6}$	$3,40 \cdot 10^{-8}$	1,06%
1	$\frac{\pi}{50}$	$1,99 \cdot 10^{-7}$	$1,61 \cdot 10^{-9}$	0,809%	$6,38 \cdot 10^{-6}$	$6,69 \cdot 10^{-8}$	1,05%
1	$\frac{\pi}{10}$	$4,92 \cdot 10^{-6}$	$4,24 \cdot 10^{-8}$	0,861%	$3,14 \cdot 10^{-5}$	$4,81 \cdot 10^{-7}$	1,53%
1	$\frac{\pi}{3}$	$5,15 \cdot 10^{-5}$	$8,38 \cdot 10^{-7}$	1,63%	$6,26 \cdot 10^{-5}$	$3,19 \cdot 10^{-5}$	51,0%
10	$\frac{\pi}{200}$	$8,26 \cdot 10^{-14}$	$2,87 \cdot 10^{-15}$	3,47%	$1,04 \cdot 10^{-11}$	$3,58 \cdot 10^{-13}$	3,44%
10	$\frac{\pi}{100}$	$3,25 \cdot 10^{-13}$	$1,00 \cdot 10^{-14}$	3,08%	$2,08 \cdot 10^{-11}$	$8,96 \cdot 10^{-13}$	4,31%
10	$\frac{\pi}{50}$	$1,34 \cdot 10^{-12}$	$8,92 \cdot 10^{-14}$	6,66%	$3,87 \cdot 10^{-11}$	$1,40 \cdot 10^{-12}$	3,62%
10	$\frac{\pi}{10}$	$4,24 \cdot 10^{-11}$	$1,66 \cdot 10^{-12}$	3,92%	$3,89 \cdot 10^{-10}$	$1,03 \cdot 10^{-10}$	26,5%
10	$\frac{\pi}{3}$	$1,87 \cdot 10^{-10}$	$3,81 \cdot 10^{-11}$	20,3%	$1,83 \cdot 10^{-9}$	$1,85 \cdot 10^{-9}$	101%

TAB. 4.3 – Calcul de la transmission du rayonnement d'une source ponctuelle directionnelle jusqu'à un détecteur ponctuel et de sa sensibilité à l'angle θ_{lim} définissant l'angle solide de détection. $N = 10^7$, $k_d = k_a = 1m^{-1}$, $\mathbf{r}_S(0, 0, 0)$, $\mathbf{r}_d(2, 0, e)$, $\mathbf{u}_S(\theta_S, \varphi_S) = (0, 0)$, $\mathbf{u}_d(\theta_d, \varphi_d) = (0, 0)$, la diffusion est isotrope.

fortes épaisseurs optiques.

4.3.4 Discussion sur les estimations de sensibilités géométriques dans ce type de problème

Dans le cadre du calcul de l'échange radiatif entre une source et un détecteur, nous pensons notamment aux sensibilités de cet échange à un déplacement ou à une déformation de la source ou du détecteur, aux sensibilités aux angles solides d'émission ou de détection, aux sensibilités

à une déformation de la géométrie du système (comme par exemple la sensibilité à l'épaisseur d'une couche monodimensionnelle, cf l'exemple du paragraphe 3.3.2) etc.

Sensibilité à un déplacement du détecteur

Dans les problèmes de type source-détecteur, le domaine d'intégration correspond à l'espace des chemins optiques. En modifiant la géométrie du problème on modifie de fait l'espace des chemins optiques et par conséquent le domaine d'intégration. Cependant, en fonction des choix de formulations et des choix algorithmiques, nous avons déjà mentionné au paragraphe 3.1.3 du chapitre 3 qu'une sensibilité pouvait être définie parfois comme une sensibilité paramétrique, parfois comme une sensibilité au domaine.

Ceci se comprend aisément avec l'exemple du calcul de l'échange radiatif entre une source et un détecteur, tous les deux ponctuels et directionnels. Considérons la sensibilité de la luminance détectée (noté L précédemment), à un déplacement de ce détecteur selon l'axe e_x , c'est-à-dire la sensibilité à la coordonnée x_d de \mathbf{r}_d la position du détecteur (voir la figure 4.22 où est représenté la géométrie du système considéré). Pour le calcul de L , que l'algorithme soit direct ou inverse (l'algorithme intégral que nous avons présenté précédemment est direct mais pourrait aisément être utilisé de façon inverse) importe peu puisque la source et le détecteur ont la même géométrie et les mêmes propriétés directionnelles. Pourtant, dans le cas du calcul de sensibilité, le choix de simuler les trajets optiques de façon directe ou inverse peut être important. Si l'algorithme intégral est utilisé de façon inverse, les chemins optiques seront simulés depuis le détecteur jusqu'à la source. Dans ce cas, si on déplace le détecteur en perturbant x_d , toutes les positions successives du trajet optiques (excepté la position de la source qui est fixe) vont être perturbées. Si on considère l'algorithme intégral de façon directe (c'est-à-dire tel qu'il a été présenté jusqu'à maintenant), le trajet optique est simulé depuis la source jusqu'au détecteur. Si on déplace le détecteur, cela ne va maintenant perturber aucune position du trajet optique (excepté bien sûr celle du détecteur). Ainsi, dans le cas inverse, la sensibilité de L à x_d est une sensibilité à la déformation du domaine¹² tandis que dans le cas direct elle devient une sensibilité paramétrique¹³.

Des estimations de la sensibilité paramétrique¹⁴ $\partial_{x_d} L$ sont présentées dans le tableau 4.2 (colonnes 5, 6 et 7). On remarque dans ce cas que la convergence du calcul de sensibilités est encore plus délicate que celle concernant le calcul de la grandeur elle-même. Les incertitudes sur le calcul de la sensibilité ne sont satisfaisantes que lorsque l'épaisseur optique est faible et la coordonnée x_d importante ($(k_a + k_d)e = 0.2$ et $x_d = 10$). Les raisons de ces difficultés de convergence aux fortes épaisseurs optiques sont les mêmes que celles invoquées pour le calcul de L . Enfin en dernière remarque, si les écart-types sont plus grands dans le cas de la sensibilité, les écart-types de l'estimation de la grandeur L ne sont pas satisfaisants non plus et l'on est en droit de penser qu'une optimisation de l'algorithme de calcul de L permettrait d'optimiser aussi le calcul de la sensibilité $\partial_{x_d} L$.

¹²Puisque l'espace des chemins optique est dépendant de x_d

¹³Le sous-domaine correspondant au tirage aléatoire de $\tilde{\sigma}_i$ (l'abscisse curviligne défini à partir de \mathbf{r}_d et \mathbf{u}_d) dans une couche monodimensionnelle va être égal à $[0, \frac{e}{\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n}_d}]$ où \mathbf{n}_d est la normale entrante dans la face de la couche où est positionné le détecteur. Ce sous-domaine ne dépend pas de x_d qui par conséquent ne sert pas à définir le domaine d'intégration de l'expression intégrale de L (expression donnée par l'équation 4.3.3).

¹⁴Ces estimations ont donc été calculées avec l'algorithme intégral utilisé de façon directe

Sensibilité à l'angle solide de détection

Au cours de l'exemple du calcul de l'échange entre une source ponctuelle directionnelle et un détecteur ponctuel, nous avons estimé la sensibilité du flux échangée F à l'angle θ_{lim} définissant l'angle solide de détection. Des résultats sont présentés dans le tableau 4.3. Il faut noter que cette sensibilité est cette fois-ci une sensibilité à la déformation du domaine¹⁵. Comme précédemment, l'algorithme se comporte moins bien aux fortes épaisseurs optiques. Il faut noter ici que la vitesse de déformation proposée au chapitre précédent n'introduit pas de source d'augmentation des écart-types et s'avère être un choix efficace pour le calcul de $\partial_{\theta_{\text{lim}}} F$.

En conclusion, des travaux d'optimisations sont nécessaires pour permettre de tirer des conclusions définitives quant à l'efficacité de l'algorithme intégral que nous avons développé. Nous pouvons cependant remarquer qu'au cours de ces exemples la formulation intégrale dans la pratique de MMC a été primordiale et a permis de surmonter des difficultés inhérentes à l'approche analogue de MMC. En ce qui concerne le calcul de sensibilités, nous observons ici que les difficultés de convergence liées au calcul de la grandeur se traduisent par des difficultés encore plus importantes dans le cas des sensibilités.

4.4 Calcul de sensibilités à la déformation géométrique d'un système

Nous présentons maintenant un exemple académique dans le but d'illustrer les perspectives d'utilisation du calcul de sensibilités à la déformation du domaine dans des applications comme le dimensionnement inverse ou l'animation en synthèse d'image.

En dimensionnement inverse (“inverse design” en anglais), il existe de nombreux algorithmes d'optimisations développés pour rechercher la géométrie optimale d'un système en fonction de contraintes imposées (dans le cadre général du calcul de transferts de chaleurs[89, 90] ou le cadre plus restreint des transferts radiatifs[91]¹⁶). Considérons par exemple un problème où l'objectif est de trouver, à l'aide de certains paramètres, la géométrie optimale du système en fonction de contraintes qui sont des flux de chaleurs pariétaux. L'idée générale de ces algorithmes de dimensionnement inverse est de faire un calcul des flux de chaleurs dans une première géométrie fixée et de calculer la sensibilité de ces flux aux paramètres. En supposant que les flux évoluent linéairement, on déforme la géométrie initiale en perturbant les paramètres selon une analyse des sensibilités. On réitère alors cette procédure un certain nombre de fois pour obtenir la meilleure solution possible. Dans le but d'accélérer ce type de procédure, la méthodologie de calcul de sensibilité par Monte-Carlo permettrait d'obtenir dès le premier calcul la matrice des flux de chaleurs et la matrice de sensibilités.

L'animation d'images de synthèse consiste à déterminer à chaque pas de temps l'illumination de chaque pixel constituant une image¹⁷. Si on considère par exemple le déplacement d'un objet

¹⁵Nous ne détaillons pas le développement du calcul de cette sensibilité qui n'a posé aucune difficulté particulière, si ce n'est celles dont nous avons déjà discuté au chapitre précédent

¹⁶Daun et Howell ont notamment étudié l'optimisation géométrique d'enceintes industrielles rayonnantes dans [92, 93] à l'aide de la méthode de Monte-Carlo.

¹⁷Une image de synthèse est calculé à l'aide de modèles consistant à calculer une grandeur radiative caracté-

dans la scène, à chaque pas de temps l'illumination sera recalculée selon la nouvelle position de l'objet. Avec le calcul de sensibilité au domaine par Monte-Carlo, il devient possible de calculer en même temps que l'image, la sensibilité de cette image aux paramètres définissant le déplacement géométrique de l'objet dans la scène (avec des temps de calcul acceptables). Dans le but d'accélérer la production d'images, on peut envisager de produire un certains nombres d'images en utilisant une approximation linéaire à l'aide des sensibilités. Ceci revient à extrapoler dans le temps l'image en tenant compte linéairement des déformations de la scène.

4.4.1 Description de l'exemple

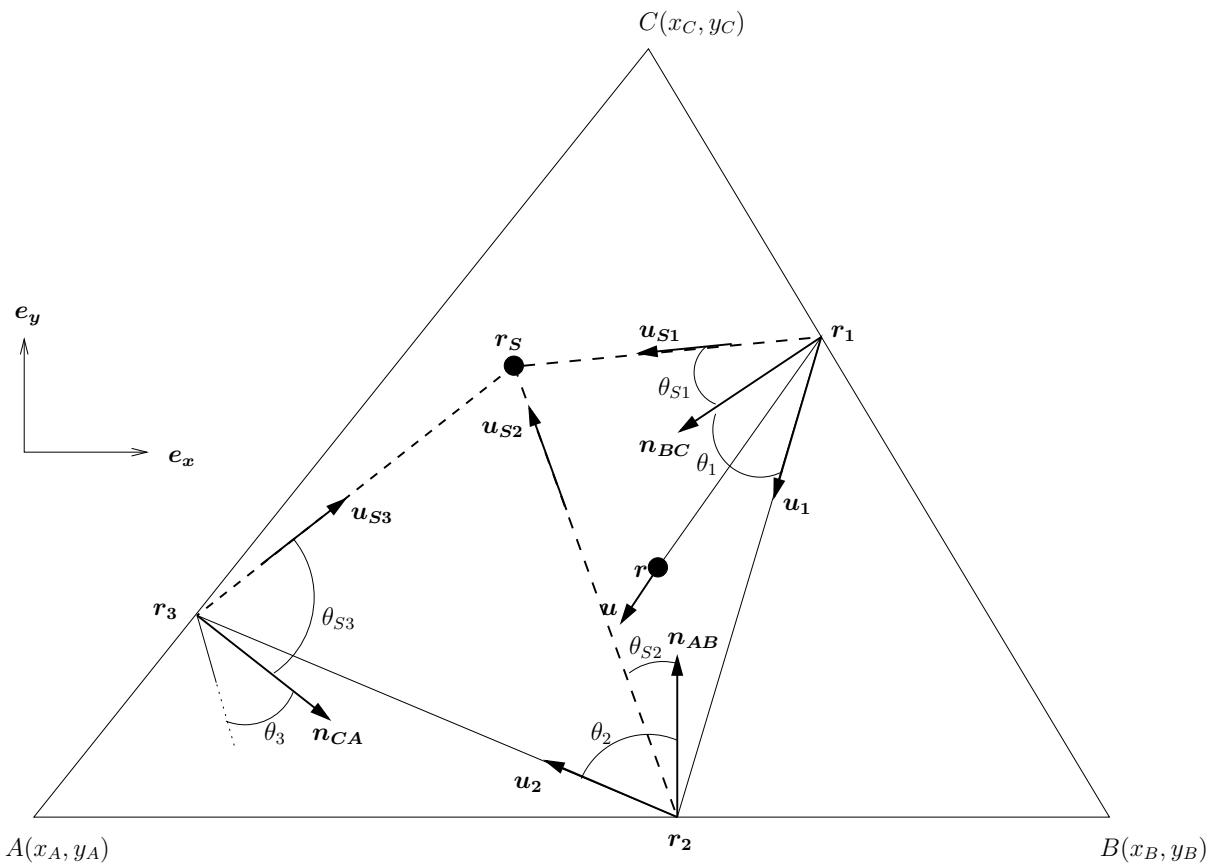


FIG. 4.25 – Représentation de la géométrie du système et description des notations utilisées pour exprimer $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$

Au cours de cet exemple, pour simplifier les développements nous considérons des transferts radiatifs bidimensionnels. Les luminances deviennent donc des puissances par unité de longueur normale et par unité d'angle (et non plus par unité de surface normale et par unité d'angle solide comme en tridimensionnel). Le système est un triangle soumis au rayonnement d'une source ponctuelle placée au point \mathbf{r}_s de coordonnées (x_s, y_s) (cf figure 4.25). Cette source est placée dans le triangle et émet une puissance radiative P isotrope et constante. Nous allons estimer

risant l'illumination en chaque pixel. Ces modèles, dit modèles d'illuminations globales, se basent sur l'équation du rendu introduite par Kajiya[21], équation déduite de l'ETR. La méthode de Monte-Carlo est fréquemment utilisée[2] pour simuler de tels modèles du fait de sa facilité de mise en oeuvre lorsque la géométrie devient complexe.

la luminance incidente $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ dans la direction \mathbf{u} en un point $\mathbf{r}(x, y)$ situé aussi à l'intérieur du triangle. Les sommets du triangle sont représentés par les trois points $A(x_A, y_A)$, $B(x_B, y_B)$ et $C(x_C, y_C)$. Le point A est situé sur l'origine du repère ($x_A = 0$, $y_A = 0$). Les trois parois du triangle sont absorbantes, réfléchissantes et non-émettrices. Les parois $[AB]$, $[BC]$ et $[CA]$ ont un coefficient de réflectivité uniforme noté respectivement ρ_{AB} , ρ_{BC} et ρ_{CA} . La réflexion est purement diffuse. L'intérieur du triangle est composé d'un milieu parfaitement transparent.

4.4.2 Écriture intégrale de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$

La luminance $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ s'écrit¹⁸ :

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = \frac{P\rho_1}{2} \left\{ \frac{\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|} + \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta_1 \frac{\rho_2}{2} \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \left\{ \frac{\mathbf{u}_{S2} \cdot \mathbf{n}_2}{2\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_S\|} + \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta_2 \frac{\rho_3}{2} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \left\{ \dots \right\} \right\} \right\} \quad (4.4.2)$$

Les notations utilisées dans cette expression sont représentées sur la figure 4.25. Cette luminance est une intégrale sur l'ensemble des chemins optiques émis au point \mathbf{r}_S et transmis jusqu'au point \mathbf{r} (dans la direction \mathbf{u}). On notera que la luminance $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ est égale à la luminance réfléchie au point \mathbf{r}_1 dans la direction \mathbf{u} où le point \mathbf{r}_1 est défini par la position de l'intersection entre la demi-droite $[\mathbf{r}, -\mathbf{u}]$ (définie par le point \mathbf{r} et la direction $-\mathbf{u}$) et la paroi du triangle intersectée.

Le premier terme de l'expression 4.4.2

$$\frac{P\rho_1}{2} \frac{\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|}$$

représente la contribution du chemin optique composé d'une seule réflexion (la réflexion a lieu en \mathbf{r}_1). $\frac{P}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|}$ représente la puissance linéique par unité de longueur normale du rayonnement émis par la source en \mathbf{r}_S et transmis au point \mathbf{r}_1 . On multiplie cette puissance linéique par $\rho_1 \frac{\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1}{2}$ afin d'obtenir la luminance correspondant à la fraction de cette puissance qui sera réfléchie vers le point \mathbf{r} (dans la direction \mathbf{u}). Dans cette expression, \mathbf{u}_{S1} est la direction de \mathbf{r}_S vers \mathbf{r}_1 : $\mathbf{u}_{S1} = \frac{\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_1\|}$; ρ_1 est le coefficient de réflectivité de la paroi sur laquelle se situe \mathbf{r}_1 et \mathbf{n}_1 est la direction normale à la paroi en \mathbf{r}_1 . Le terme

$$\frac{\rho_1}{2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta_1 \frac{\rho_2}{2} (\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1) \frac{P(\mathbf{u}_{S2} \cdot \mathbf{n}_2)}{2\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_S\|} \quad (4.4.3)$$

représente la contribution de l'ensemble des chemins optiques à deux réflexions. Ces chemins optiques partent du point \mathbf{r}_S , subissent une première réflexion en \mathbf{r}_2 , puis une seconde réflexion

¹⁸Dans cette expression, nous n'avons pas pris en compte le terme d'irradiation directe car celui-ci est généralement nul. Pour que ce terme ait une contribution non nulle sur la luminance, il faudrait qu'un rayon émis depuis la source (position \mathbf{r}_S) vers la direction \mathbf{u} atteigne la position d'observation \mathbf{r} . Ce terme d'irradiation directe s'exprime par :

$$\frac{P}{2\pi \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_S\|} \delta(\mathbf{u} - \frac{\mathbf{r}_S - \mathbf{r}}{\|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}\|}) \quad (4.4.1)$$

où l'introduction d'un dirac $\delta(\mathbf{u} - \frac{\mathbf{r}_S - \mathbf{r}}{\|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}\|})$ traduit cette condition particulière.

au point \mathbf{r}_1 avant d'être transmis jusqu'au point \mathbf{r} (dans la direction \mathbf{u}). $\frac{\rho_2}{2} \frac{P(\mathbf{u}_{S2} \cdot \mathbf{n}_2)}{2\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_S\|}$ représente la luminance du rayonnement transmis depuis \mathbf{r}_S et réfléchi en \mathbf{r}_2 vers le point \mathbf{r}_1 . En multipliant cette luminance par $\frac{\rho_1(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1)}{2}$, on obtient la contribution d'un chemin optique à deux réflexions. L'intégration de θ_1 sur $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ (où θ_1 est l'angle entre \mathbf{n}_1 et $\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|}$) permet d'intégrer sur l'ensemble des positions de réflexions possibles sur les parois du triangle. Pour des besoins ultérieurs, on notera que \mathbf{r}_2 ne peut pas être situé sur la même paroi que \mathbf{r}_1 . Tous les autres termes de l'intégrale 4.4.2 représentent la contribution de l'ensemble des trajets optiques avec plus de deux réflexions.

Nous noterons \mathbf{r}_i la position de la première réflexion d'un trajet optique à i réflexions. Cette position \mathbf{r}_i est aussi la $j-i+1$ ème position de réflexion d'un trajet optique à j réflexions (par exemple dans un trajet optique à j réflexions, \mathbf{r}_1 est la j ème et donc dernière position de réflexion). Chaque position \mathbf{r}_i est déterminée à partir de la position \mathbf{r}_{i-1} et de la direction \mathbf{u}_{i-1} (\mathbf{u}_{i-1} étant lui-même défini par l'angle θ_{i-1}) : il s'agit du point d'intersection entre la paroi du triangle et la demi-droite $[\mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{u}_{i-1}]$.

4.4.3 Algorithme de Monte-Carlo utilisé

L'algorithme déduit de l'expression 4.4.2 sera de type inverse puisque chaque chemin optique est décrit d'abord par sa dernière position de réflexion (\mathbf{r}_1), puis par son avant-dernière (\mathbf{r}_2) etc. , c'est-à-dire en suivant son parcours dans son sens inverse.

Après introduction des densités de probabilités, l'équation 4.4.2 devient :

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_1}(\theta_1) d\theta_1 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_2}(\theta_2) d\theta_2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_3}(\theta_3) d\theta_3 \dots \frac{\rho_1}{2} \left\{ \frac{P(\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1)}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\rho_2(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1)}{2p_{\Theta_1}(\theta_1)} \left\{ \frac{P(\mathbf{u}_{S2} \cdot \mathbf{n}_2)}{2\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_S\|} + \frac{\rho_3(\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2)}{2p_{\Theta_2}(\theta_2)} \left\{ \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Cet algorithme consiste à générer aléatoirement une succession de positions de réflexion \mathbf{r}_i en quantifiant à chaque étape la puissance radiative émise en \mathbf{r}_S , réfléchie successivement en \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_{i-1} , ..., \mathbf{r}_1 et transmise au point \mathbf{r} dans la direction \mathbf{u} .

Le domaine d'intégration $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times \dots$ est de dimension infinie du fait des phénomènes de réflexions multiples. Pour ne pas générer indéfiniment des positions de réflexions sur les parois du triangle, on introduit communément dans ce type d'algorithme un test déterminant s'il y a réflexion ou absorption sur la paroi : on génère à chaque nouvelle position de réflexion \mathbf{r}_i un nombre aléatoire $x_i \in [0, 1]$: si ce nombre est inférieur au coefficient de réflectivité ρ_i de la paroi en \mathbf{r}_i , alors on considère qu'il y a réflexion et on continue les générations aléatoires. Si ce nombre est supérieur à ρ_i , alors on considère qu'il y a absorption à la paroi et on arrête la génération aléatoire du trajet optique. Ceci se traduit formellement par le remplacement dans l'expression 4.4.4 de ρ_i par l'intégrale $\rho_i = \int_0^1 H(\rho_i - x_i) dx_i$:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_1}(\theta_1) d\theta_1 \int_0^1 dx_2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_2}(\theta_2) d\theta_2 \dots \frac{\rho_1}{2} \left\{ \frac{P(\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1)}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|} + \right. \\ &\quad \left. H(\rho_2 - x_2) \frac{\cos \theta_1}{2p_{\Theta_1}(\theta_1)} \left\{ \frac{P(\mathbf{u}_{S2} \cdot \mathbf{n}_2)}{2\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_S\|} + H(\rho_3 - x_3) \frac{\cos \theta_2}{2p_{\Theta_2}(\theta_2)} \left\{ \dots \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

L'algorithme correspondant est décrit sur la figure 4.26. Nous choisissons les densités de probabi-

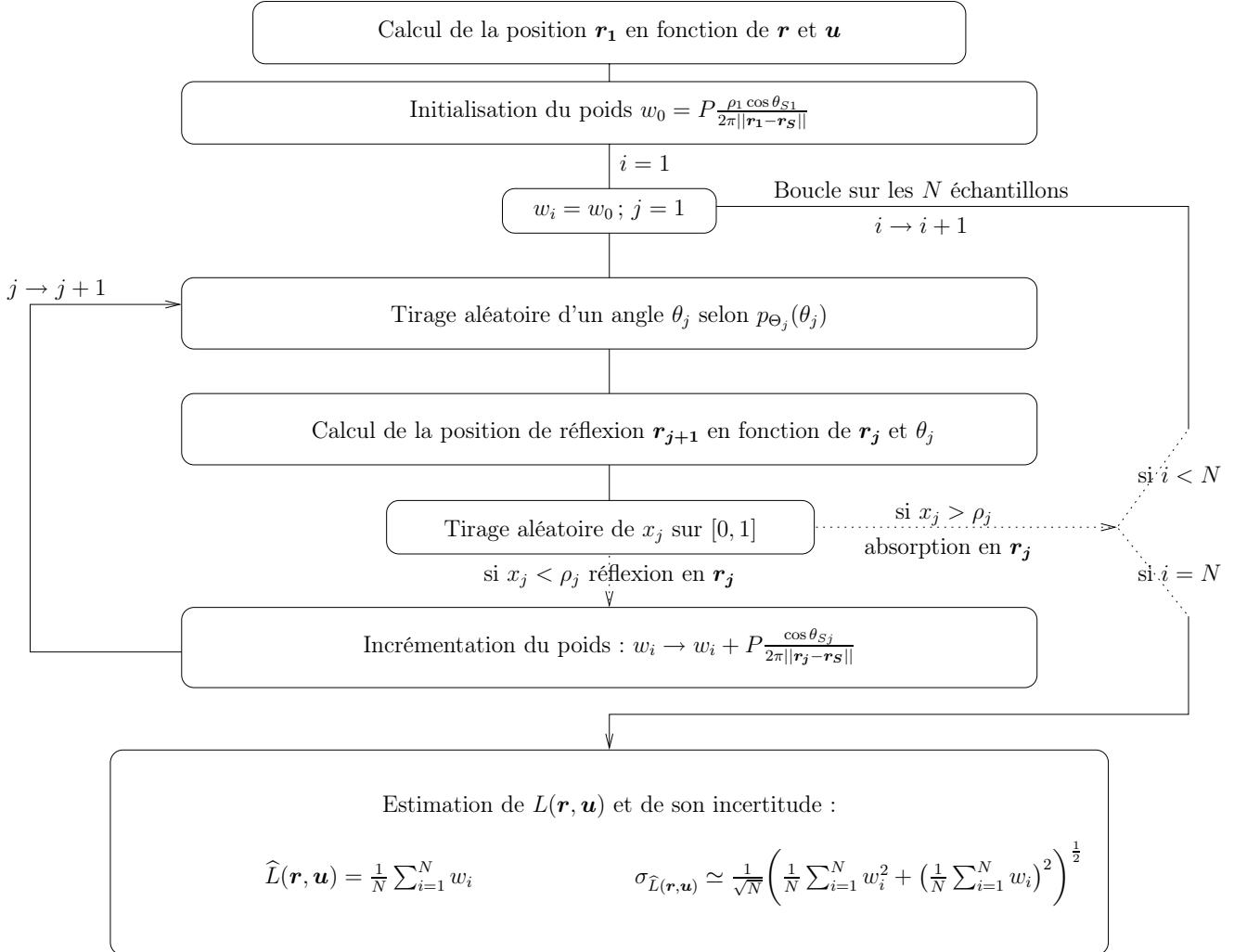


FIG. 4.26 – Algorithme de calcul utilisé pour estimer la luminance $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ et son incertitude.

lités angulaires en fonction des lois de réflexions diffuses (pour un rayonnement bidimensionnel) :

$$\forall i \in \mathbb{N}^+ \quad p_{\Theta_i}(\theta_i) = \frac{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_i}{2} \quad (4.4.6)$$

On réécrit alors $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ sous la forme suivante :

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_1}(\theta_1) d\theta_1 \int_0^1 dx_2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_2}(\theta_2) d\theta_2 \dots w(\theta_1, x_2, \theta_2, x_3, \dots) \quad (4.4.7)$$

où la fonction poids $w(\theta_1, \theta_2, \dots)$ est égale à :

$$w(\theta_1, x_2, \theta_2, x_3, \dots) = \frac{\rho_1}{2} \left\{ P \frac{(\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1)}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|} + H(\rho_2 - x_2) \left\{ P \frac{(\mathbf{u}_{S2} \cdot \mathbf{n}_2)}{2\pi \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_S\|} + H(\rho_3 - x_3) \left\{ \dots \right\} \right\} \right\} \quad (4.4.8)$$

4.4.4 Développement du calcul de la sensibilité $\partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$

Intéressons-nous maintenant au calcul de la sensibilité de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ à un déplacement du point $C(x_C, y_C)$ selon le vecteur \mathbf{e}_x , c'est-à-dire la sensibilité à l'abscisse x_C du point C .

Le domaine d'intégration D dans l'expression 4.4.5 s'écrit :

$$D = [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times [0, 1] \times [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times [0, 1] \dots \quad (4.4.9)$$

Ce domaine d'intégration D ne dépend pas du paramètre x_C . Cependant, similairement à l'exemple traité dans le paragraphe 3.3.2 du chapitre précédent, la formulation intégrale de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$, adaptée à l'algorithme, va poser des problèmes de dérivée des fonctions heavisides : pour surmonter cette difficulté, nous allons appliquer à nouveau la démarche méthodologique proposé dans le paragraphe 3.3.2 du chapitre 3. Mais avant cela, identifions les causes de ces difficultés :

L'expression 4.4.5 de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ ne semble pas poser de problèmes a priori¹⁹. Pourtant, en nous intéressant de manière plus précise aux calculs des positions de réflexion, nous allons voir que cette expression de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ est incomplète.

Considérons par exemple la position \mathbf{r}_{i+1} , déterminée à partir de l'intersection entre une des parois du triangle et la demi-droite partant de \mathbf{r}_i dans la direction \mathbf{u}_i (définie par l'angle θ_i). θ_i est généré aléatoirement sur $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. Supposons par exemple que la position \mathbf{r}_i soit sur la paroi $[AB]$ du triangle comme sur la figure 4.27. En fonction de l'angle θ_i , la paroi du

La position \mathbf{r}_{i+1} peut changer de paroi suite à une perturbation du paramètre x_C

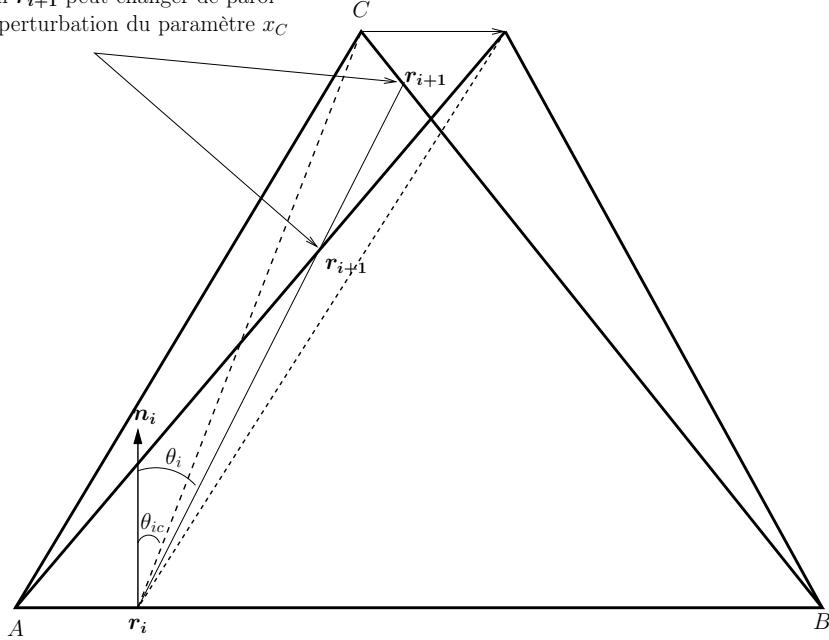


FIG. 4.27 – Représentation du problème posé par le calcul d'intersection lors d'une perturbation d'un paramètre géométrique

triangle sur laquelle va se positionner \mathbf{r}_{i+1} va être soit $[BC]$ soit $[CA]$. On définit alors un angle critique appelé θ_{ci} tel qu'en fonction du signe de $(\theta - \theta_{ci})$, \mathbf{r}_{i+1} sera sur l'une ou l'autre des deux parois. Dans la figure 4.27, si $\theta_{ci} < \theta$, alors \mathbf{r}_{i+1} sera sur $[CA]$ tandis que si $\theta > \theta_{ci}$,

¹⁹Les fonctions heaviside $H(\rho_i - x_i)$, $\forall i$ ne dépendent pas de x_C et ne vont donc pas être dérivées.

\mathbf{r}_{i+1} sera sur $[BC]$. Considérons alors une perturbation du paramètre x_C . Cette perturbation peut impliquer le changement de paroi de \mathbf{r}_{i+1} : l'exemple présentée sur la figure 4.27 montre qu'il existe une gamme de θ_i pour lesquels \mathbf{r}_{i+1} change de paroi suite à une perturbation du paramètre x_C . Lorsque cette perturbation est infinitésimale, cela se traduit formellement par une discontinuité de la fonction à intégrer sur le domaine D lorsque $\theta = \theta_{ci}$, discontinuité provoquant les problèmes de dérivabilité.

D'un point de vue algorithmique, nous n'avons pas détaillé les conditions imposées par les calculs d'intersections : chaque position de réflexion²⁰ \mathbf{r}_i peut se positionner sur deux parois différentes. En conséquence, l'algorithme va évoluer de deux manières différentes en fonction de ce positionnement. Par exemple, si \mathbf{r}_i est sur $[AB]$, $\rho_i = \rho_{AB}$ et $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_{AB}$, tandis que si \mathbf{r}_i est sur $[BC]$, ρ_i et \mathbf{n}_i prennent deux valeurs différentes (ρ_{BC} et \mathbf{n}_{BC}).

D'un point de vue formel, l'expression 4.4.5 de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ est donc incomplète puisqu'elle ne tient pas compte des conditions imposées par le calcul d'intersection. Dans le but de compléter cette expression, nous introduisons les notations suivantes : à chaque nouvelle position \mathbf{r}_i , on définit un angle θ_{ci} limite (déjà introduit précédemment) tel qu'en fonction du signe de $(\theta_i - \theta_{ci})$, on puisse déterminer sur quelle paroi va se retrouver \mathbf{r}_{i+1} . La paroi pour laquelle $(\theta - \theta_{ci})$ est négatif sera appelée la paroi gauche (dans la figure 4.27, cette paroi est $[CA]$). Nous noterons les propriétés caractérisant cette paroi par un indice g . La paroi pour laquelle $(\theta_i - \theta_{ci})$ est positif sera appelée la paroi droite et nous utiliserons un indice d pour noter ses propriétés. Nous réécrivons alors $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ en tenant compte des conditions liées au calcul d'intersections.

$$\begin{aligned}
 L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = & \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_1}(\theta_1) d\theta_1 \int_0^1 dx_2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_2}(\theta_2) d\theta_2 \dots \frac{\rho_1}{2} \left\{ \frac{P(\mathbf{u}_{S1} \cdot \mathbf{n}_1)}{2\pi \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_S\|} + \right. \\
 & \left[H(\theta_{c1} - \theta_1) \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2g}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2g}) d\rho_2 \right) \right. \\
 & \left. + H(\theta_1 - \theta_{c1}) \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2d}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2d}) d\rho_2 \right) \right] \\
 & \left[H(\theta_{c2} - \theta_2) \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3g}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3g}) d\rho_3 \right) + \right. \\
 & \left. H(\theta_2 - \theta_{c2}) \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3d}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3d}) d\rho_3 \right) \right] \dots w(\theta_1, \mathbf{n}_2, \boldsymbol{\rho}_2, x_2, \theta_2, \dots)
 \end{aligned} \tag{4.4.10}$$

Le produit $H(\theta_{ci} - \theta_i) \int \delta(\rho_{i+1} - \rho_{(i+1)g}) d\rho_{i+1} \int \delta(\mathbf{n}_{i+1} - \mathbf{n}_{(i+1)g}) d\mathbf{n}_{i+1}$ s'annule si $\theta_{ci} - \theta_i < 0$, c'est-à-dire si \mathbf{r}_{i+1} est positionné sur la paroi droite. Dans le cas où $\theta_{ci} - \theta_i < 0$, alors \mathbf{r}_{i+1} est positionné sur la paroi gauche, la normale \mathbf{n}_{i+1} en \mathbf{r}_{i+1} est égale à $\mathbf{n}_{(i+1)g}$ et $\rho_{i+1} = \rho_{(i+1)g}$ (δ étant la fonction Dirac). L'angle θ_{ci} étant dépendant de la position des sommets du triangle, et donc de x_C , ce sont donc les dérivées des fonctions $H(\theta_{ci} - \theta_i)$ et $H(\theta_i - \theta_{ci})$ ($\forall i \in \mathbb{N}^+$) qui sont la source des difficultés dans cet exemple. Avec la formulation 4.4.10, nous sommes confrontés aux mêmes types de problème que lors du paragraphe 3.3.2.

²⁰Excepté \mathbf{r}_1 qui est défini à partir de \mathbf{r} et \mathbf{u}

Remarque 1 sur l'expression 4.4.10 La notation $\int \delta(\rho_{i+1} - \rho_{(i+1)g}) d\rho_{i+1} \int \delta(\mathbf{n}_{i+1} - \mathbf{n}_{(i+1)g}) d\mathbf{n}_{i+1}$ a été choisie pour formaliser le fait que $\rho_{i+1} = \rho_{(i+1)g}$ et $\mathbf{n}_{i+1} = \mathbf{n}_{(i+1)g}$ lorsque la paroi gauche est intersectée. Il ne faut donc pas attribuer de sens algorithme à ces intégrales.

Remarque 2 sur l'expression 4.4.10 Dans l'expression 4.4.10, si on note $f(\mathbf{n}_i, \rho_i) = \delta(\mathbf{n}_i - \mathbf{n})\delta(\rho_i - \rho)$, l'expression suivante

$$\left[H(\theta_{c(i-1)} - \theta_{i-1}) \int d\mathbf{n}_i \int d\rho_i f(\mathbf{n}_{ig}, \rho_{ig}) + H(\theta_{i-1} - \theta_{c(i-1)}) \int d\mathbf{n}_i \int d\rho_i f(\mathbf{n}_{id}, \rho_{id}) \right] \quad (4.4.11)$$

est défini, $\forall i$, comme un opérateur agissant sur le poids $w(\theta_1, \dots, \mathbf{n}_i, \rho_i, \dots)$ tel que

$$\begin{aligned} & \left[H(\theta_{c(i-1)} - \theta_{i-1}) \int d\mathbf{n}_i \int d\rho_i f(\mathbf{n}_{ig}, \rho_{ig}) + H(\theta_{i-1} - \theta_{c(i-1)}) \int d\mathbf{n}_i \int d\rho_i f(\mathbf{n}_{id}, \rho_{id}) \right] \\ & \times w(\theta_1, \dots, \mathbf{n}_i, \rho_i, \dots) = \\ & H(\theta_{c(i-1)} - \theta_{i-1}) \int d\mathbf{n}_i \int d\rho_i f(\mathbf{n}_{ig}, \rho_{ig}) w(\theta_1, \dots, \mathbf{n}_i, \rho_i, \dots) + \\ & H(\theta_{i-1} - \theta_{c(i-1)}) \int d\mathbf{n}_i \int d\rho_i f(\mathbf{n}_{id}, \rho_{id}) w(\theta_1, \dots, \mathbf{n}_i, \rho_i, \dots) \end{aligned} \quad (4.4.12)$$

Nous allons donc appliquer pour estimer $\partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ la démarche méthodologique présentée dans ce paragraphe 3.3.2 dont nous rappelons les étapes principales :

- 1. Écriture de la formulation intégrale de la grandeur associée à l'algorithme de MMC utilisé
- 2. Travaux de reformulation permettant d'écrire une expression de la grandeur sous une forme évitant la dérivation de fonctions échelons.
- 3. Calcul de la vitesse de déformation du domaine et expression de la sensibilité
- 4. Reformulation en une expression de la sensibilité adaptée à l'algorithme de MMC initial
- 5. Écriture du poids de Monte-Carlo associé à l'estimation de la sensibilité

1. Écriture de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ sous une forme adaptée à l'algorithme de MMC utilisé La formulation intégrale de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ associée à l'algorithme est donnée par l'expression 4.4.10.

2. Travaux de reformulation permettant d'écrire $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ sous une forme dérivable Les problèmes de dérivarilité étant liés à la présence de fonctions $H(\theta_{ci} - \theta_i)$ et $H(\theta_i - \theta_{ci})$, nous reformulons $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ de façon à les supprimer. Pour cela on utilise la relation :

$$\begin{aligned} & \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta_i \quad H(\theta_{ci} - \theta_i) \left(\int \delta(\mathbf{n}_{i+1} - \mathbf{n}_{(i+1)g}) d\mathbf{n}_{i+1} \int \delta(\rho_{i+1} - \rho_{(i+1)g}) d\rho_{i+1} \right) = \\ & \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\theta_{ci}} \int \delta(\mathbf{n}_{i+1} - \mathbf{n}_{(i+1)g}) d\mathbf{n}_{i+1} \int \delta(\rho_{i+1} - \rho_{(i+1)g}) d\rho_{i+1} d\theta_i \end{aligned} \quad (4.4.13)$$

$L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = & \left[\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\theta_{c1}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2g}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2g}) d\rho_2 \right) d\theta_1 + \right. \\
& \left. \int_{\theta_{c1}}^{\frac{\pi}{2}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2d}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2g}) d\rho_2 \right) d\theta_1 \right] p_{\Theta_1}(\theta_1) \\
& \int_0^1 dx_2 \left[\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\theta_{c2}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3g}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3g}) d\rho_3 \right) d\theta_2 + \right. \\
& \left. \int_{\theta_{c2}}^{\frac{\pi}{3}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3d}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3g}) d\rho_3 \right) d\theta_2 \right] p_{\Theta_2}(\theta_2) \\
& \int_0^1 dx_3 \dots w(\theta_1, x_2, \theta_2, x_3 \dots)
\end{aligned} \tag{4.4.14}$$

3. Calcul de la vitesse de déformation du domaine \mathbf{V}_{x_C} et expression de la sensibilité $\partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$: pour calculer la vitesse il ne reste plus qu'à appliquer les expressions données au paragraphe 3.2.2 du chapitre précédent en se basant sur la formulation intégrale 4.4.14.

Commençons par déterminer la première composante de \mathbf{V}_{x_C} : celle-ci va s'exprimer de deux manières distinctes selon le signe de $\theta_{c1} - \theta_1$: supposons dans un premier temps que $\theta_{c1} - \theta_1$ soit positif, la composante de $V_{x_C,1g}$ (que nous noterons alors $V_{x_C,1g}$) de \mathbf{V}_{x_C} va être égale à :

$$V_{x_C,1g}(\theta_1) = \frac{\partial_{x_C} \theta_{c1}}{\theta_{c1} + \frac{\pi}{2}} (\theta_1 + \frac{\pi}{2}) \tag{4.4.15}$$

Si maintenant $\theta_{c1} - \theta_1$ est négatif alors $V_{x_C,1} = V_{x_C,1d}$ avec

$$V_{x_C,1d}(\theta_1) = \partial_{x_C} \theta_{c1} + \frac{-\partial_{x_C} \theta_{c1}}{\frac{\pi}{2} - \theta_{c1}} (\theta_1 - \theta_{c1}) \tag{4.4.16}$$

Pour les composantes suivantes de \mathbf{V}_{x_C} , on suit le même raisonnement : si $\theta_{ci} - \theta_i > 0$ alors

$$V_{x_C,i} = V_{x_C,ig}(\theta_1, \dots, \theta_i; x_C) = \frac{V_{x_C,i}|_{\theta_i=\theta_{ci}}}{\theta_{ci} + \frac{\pi}{2}} (\theta_i + \frac{\pi}{2}) \tag{4.4.17}$$

avec

$$V_{x_C,i}|_{\theta_i=\theta_{ci}} = \partial_{x_C} \theta_{ci} + \sum_{k=1}^{i-1} V_{x_C,k}(\theta_1, \dots, \theta_k; x_C) \partial_{\theta_k} \theta_{ci} \tag{4.4.18}$$

Si $\theta_{ci} - \theta_i < 0$ alors

$$V_{x_C,i} = V_{x_C,id}(\theta_1, \dots, \theta_i; x_C) = \partial_{x_C} \theta_{ci} + \frac{-V_{x_C,i}|_{\theta_i=\theta_{ci}}}{\frac{\pi}{2} - \theta_{ci}} (\theta_i - \theta_{ci}) \tag{4.4.19}$$

Ainsi on construit composante par composante \mathbf{V}_{x_C} en appliquant les équations 3.2.18 et 3.2.19 donnée au chapitre précédent (paragraphe 3.2.2).

La sensibilité s'exprime alors par :

$$\begin{aligned}
 \partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = & \left[\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\theta_{c1}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2g}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2g}) d\rho_2 \int \delta(V_{x_C,1} - V_{x_C,1g}) dV_{x_C,1} \right) d\theta_1 + \right. \\
 & \left. \int_{\theta_{c1}}^{\frac{\pi}{2}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2d}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2g}) d\rho_2 \int \delta(V_{x_C,1} - V_{x_C,1d}) dV_{x_C,1} \right) d\theta_1 \right] p_{\Theta_1}(\theta_1) \\
 & \int_0^1 dx_2 \left[\int_{\theta_{c2}}^{\frac{\pi}{2}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3g}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3g}) d\rho_3 \int \delta(V_{x_C,2} - V_{x_C,2g}) dV_{x_C,2} \right) d\theta_2 + \right. \\
 & \left. \int_{\theta_{c2}}^{\frac{\pi}{3}} \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3d}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3g}) d\rho_3 \int \delta(V_{x_C,2} - V_{x_C,2d}) dV_{x_C,2} \right) d\theta_2 \right] p_{\Theta_2}(\theta_2) \\
 & \int_0^1 dx_3 \dots \left\{ \partial_{x_C} w + \frac{\nabla \cdot (w \prod_k p_{\Theta_k}) \mathbf{V}_{x_C}}{\prod_k p_{\Theta_k}} \right\} \tag{4.4.20}
 \end{aligned}$$

4. Reformulation en une expression de $\partial_{x_C} L$ adaptée à l'algorithme initial Le retour à une formulation adaptée à l'algorithme initial se fait par les développements inverses de ceux présentés lors de l'étape 2. La sensibilité peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = & \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_1}(\theta_1) d\theta_1 \int_0^1 dx_2 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} p_{\Theta_2}(\theta_2) d\theta_2 \dots \times \\
 & \left[H(\theta_{c1} - \theta_1) \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2g}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2g}) d\rho_2 \int \delta(V_{x_C,1} - V_{x_C,1g}) dV_{x_C,1} \right) + \right. \\
 & H(\theta_1 - \theta_{c1}) \left(\int \delta(\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_{2d}) d\mathbf{n}_2 \int \delta(\rho_2 - \rho_{2d}) d\rho_2 \int \delta(V_{x_C,1} - V_{x_C,1d}) dV_{x_C,1} \right) \\
 & \left. \left[H(\theta_{c2} - \theta_2) \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3g}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3g}) d\rho_3 \int \delta(V_{x_C,2} - V_{x_C,2g}) dV_{x_C,2} \right) + \right. \right. \\
 & H(\theta_2 - \theta_{c2}) \left(\int \delta(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_{3d}) d\mathbf{n}_3 \int \delta(\rho_3 - \rho_{3d}) d\rho_3 \int \delta(V_{x_C,2} - V_{x_C,2d}) dV_{x_C,2} \right) \\
 & \left. \dots \left\{ \partial_{x_C} w + \frac{\nabla \cdot (w \prod_k p_{\Theta_k}) \mathbf{V}_{x_C}}{\prod_k p_{\Theta_k}} \right\} \right] \tag{4.4.21}
 \end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi une expression de la sensibilité adaptée à l'algorithme de calcul de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$.

Remarque sur le calcul de $\partial_{x_C} L$ Nous remarquons ici que pour estimer la sensibilité, nous sommes contraints d'entrer dans le détails des calculs d'intersections. Ici, ces calculs ne posent pas de difficulté puisque seules deux parois peuvent être intersectées par le trajet optique à chaque nouvelle génération aléatoire d'une position de réflexion. Si on étend ce raisonnement à des problèmes multidimensionnels et à des géométries réelles découpées en mailles, au cours de la simulation d'un trajet optique, un rayon est susceptible de traverser plusieurs mailles. Pour pouvoir alors simuler le trajet optique, le code de simulation numérique doit aller chercher des données telles que la taille des mailles intersectées, les positions d'entrée dans la maille, les positions de sortie, la distance parcourue à l'intérieur de chacune de ces mailles etc. Ainsi, ajouter

différentes estimations de sensibilités à la géométrie dans un code où les calculs d'intersections représentent un pourcentage important du coût en temps de calcul impliquera certainement un coût supplémentaire significatif. Cependant nous verrons dans les résultats qui suivent que ce coût supplémentaire en temps de calcul pourra être très inférieur au gain offert par ces estimations simultanées de sensibilités, notamment à travers l'utilisation de modèles linéaires d'évolution des grandeurs radiatives en fonction des perturbations géométriques.

Exemples de résultats Tous les calculs présentés par la suite ont été effectués avec la configuration paramétrique suivante : la source est localisé au point $\mathbf{r}_S(x_S = 2,5; y_S = 0,1)$. Le point d'observation est $\mathbf{r}(x = 4; y = 0,1)$. La direction d'observation \mathbf{u} est égale à $-\mathbf{e}_y$. Les coordonnées du triangle sont $A(0,0), B(5,0), C(x_C, 3)$; $P = 100W$. $\rho_{AB} = \rho_{BC} = \rho_{CA} = 0.5$. Le nombre d'échantillons à chaque calcul Monte-Carlo est égal à $N = 10^7$.

Pour les résultats présentés sur les figures 4.28 et 4.29, la luminance est donnée en $W.m^{-1}.rad^{-1}$, les coordonnées des différents points sont données en m , la sensibilité est donnée en $W.m^{-2}.rad^{-1}$. Dans cet exemple, si on note t_0 le temps de calcul nécessaire à une estimation seule de $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$, le

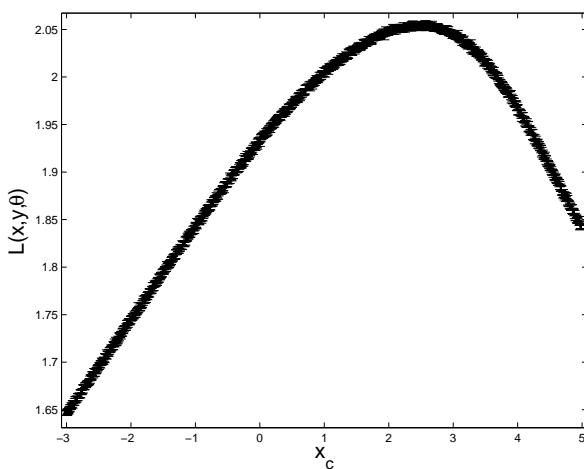


FIG. 4.28 – Calcul de $L(x, y, \theta) = L(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ en fonction de x_C .

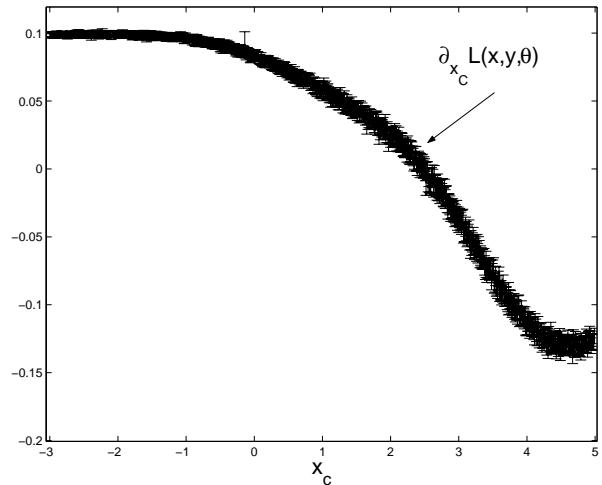


FIG. 4.29 – Calcul de $\partial_{x_C} L(x, y, \theta)$ en fonction de x_C .

temps de calcul nécessaire à l'estimation simultanée de L et de $\partial_{x_C} L$ est de l'ordre de $1,6t_0$. Ce temps supplémentaire est important, pour les raisons données dans la remarque précédente, soit principalement à cause des calculs des dérivées des angles critiques qui nécessitent de rentrer dans le détail des calculs d'intersections.

Commentaire sur les possibilités d'application à la synthèse d'image animées Dans ce domaine, la question sera de comparer :

1. les temps de calcul supplémentaires associés aux calculs de sensibilité aux paramètres de la déformation de la scène
2. les gains de rapidité et les pertes de qualité associés à l'espacement des calculs Monte-Carlo, les images intermédiaires étant calculées de manière approchée à partir des sensibilités²¹.

²¹De manière similaire au modèle utilisé par A de Lataillade[1] pour coupler les transferts radiatifs à la cinétique chimique dans des systèmes en combustion

Par exemple, supposons qu'à un instant $t = t_0$, nous estimons $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})|_{t_0}$ et sa sensibilité au paramètre x_C . A l'instant suivant $t = t_1$, un modèle linéaire consisterait à approximer $L(\mathbf{r}, \mathbf{u})|_{t_1}$ par :

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{u})|_{t_1} = L(\mathbf{r}, \mathbf{u})|_{t_0} + \left(x_C|_{t_1} - x_C|_{t_0} \right) \partial_{x_C} L(\mathbf{r}, \mathbf{u})|_{t_0} \quad (4.4.22)$$

Les figures 4.30(a), 4.30(b) et 4.30(c) illustrent le compromis entre temps de calcul et précision résultant classiquement de ce type d'approximation linéaire. Ce qui est avant tout à retenir de ces résultats est que la qualité des sensibilités calculées par notre approche permet d'envisager ce type d'extrapolations linéaires. Elles seraient inenvisageable s'il s'agissait de s'appuyer sur deux calculs Monte-Carlo successifs pour estimer la matrice jacobienne : comme nous l'avons vu au chapitre 3 (paragraphes 3.3.1 et 3.3.2), les incertitudes statistiques seraient très importantes et il serait impossible de prévoir efficacement la tendance d'évolution. Ici, aucun comportement pathologique n'apparaît et une augmentation du temps de calcul d'un facteur 1,6 permet de proposer une extrapolation fiable sur toute la plage de linéarité.

La question délicate reste bien sûr (comme toujours dans ce type d'approche) de prévoir l'extension de cette plage de linéarité. Pendant combien de pas de temps peut-on s'appuyer sur la matrice jacobienne pour une précision donnée ?

Une des possibilités de réponse serait d'utiliser un calcul des sensibilités au second ordre pour établir un critère de validité de la linéarité de l'extrapolation linéaire.

Dans le cas d'une sensibilité paramétrique, ce calcul de sensibilités au second ordre se baserait sur le même principe que le calcul d'une sensibilité au premier ordre. Cette question, déjà posée dans le cadre de la thèse d'A de Lataillade[1], reste en suspens pour le moment à cause notamment des problèmes de stockage et de place-mémoire : lorsque la déformation étudiée du système est plus compliquée que celle présentée dans cet exemple, il se peut que de nombreuses sensibilités doivent être calculées pour tenir compte de cette déformation. La matrice de sensibilités peut alors avoir des dimensions très importantes au second ordre. C'est notamment le cas si le système est décrit par un maillage tridimensionnel lui-même affecté par la déformation géométrique : du fait des dérivées croisées, chaque vecteur de sensibilités a alors une dimension au carré de la dimension du maillage.

Dans le cas de sensibilités à la déformation du domaine, les développements présentés au chapitre précédent ne sont plus strictement applicables lorsque l'on considère des sensibilités au second ordre. Il serait alors nécessaire de reconstruire notamment les contraintes de dérivabilité du champ de vitesse aux frontières du domaine.

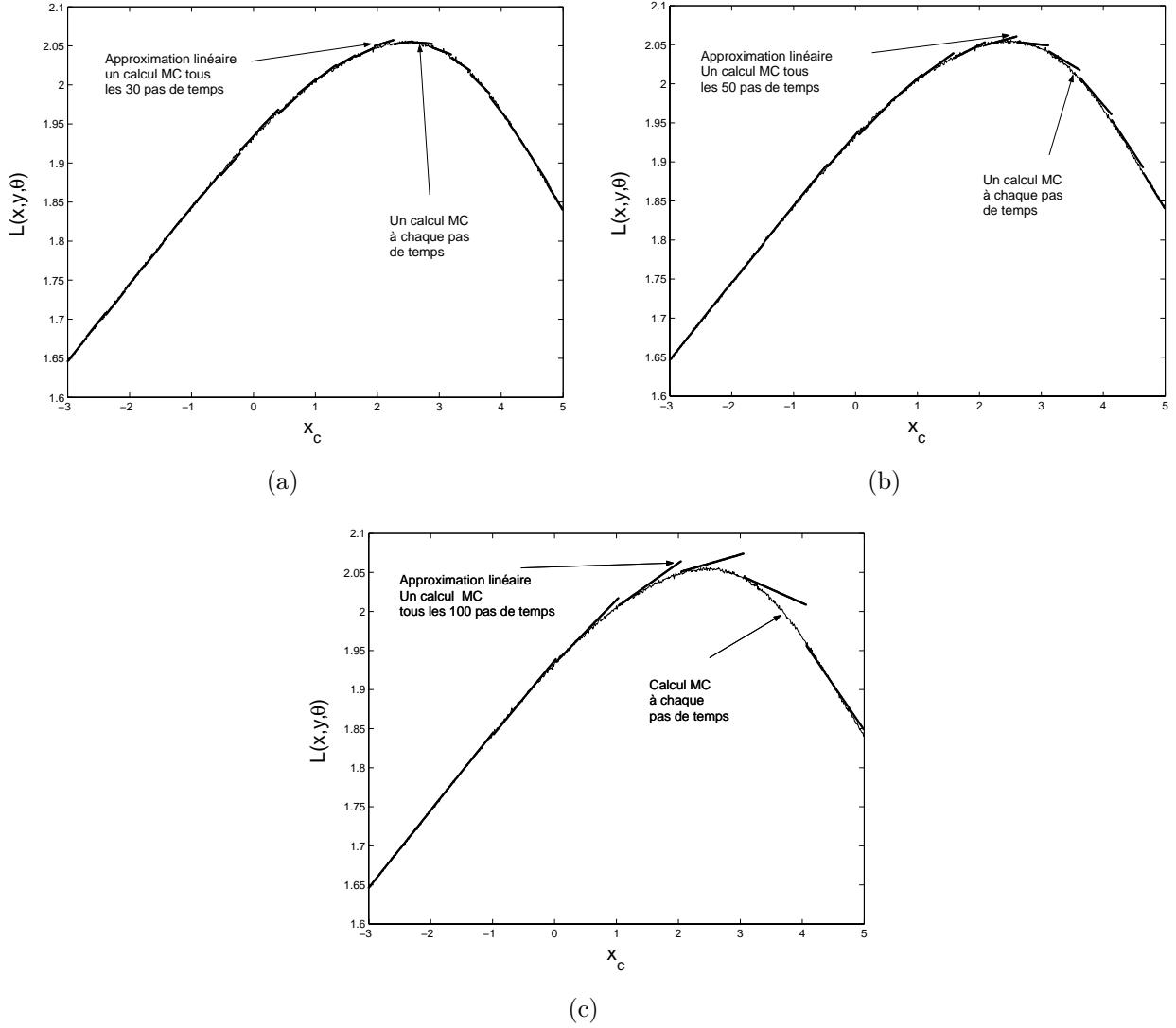


FIG. 4.30 – Comparaison entre un calcul par Monte-Carlo (calcul MC) à chaque pas de temps et un calcul basé sur une approximation linéaire (avec un calcul par Monte-Carlo tous les 30 pas de temps (figure 4.30(a)), tous les 50 pas de temps (figure 4.30(b)) et tous les 100 pas de temps (figure 4.30(c)). A chaque pas de temps, x_C (donné en m) se déplace de 1cm. x_C se déplace de -3m à 5m durant 800 pas de temps.

Chapitre 5

Conclusions et perspectives

Au cours de cette étude sur le calcul de sensibilité par la méthode de Monte-Carlo (MMC), nous nous sommes posés des questions d'ordre méthodologiques du type : comment estimer la sensibilité d'une grandeur à des paramètres servant à définir le domaine d'intégration ? Peut-on traiter le temps comme un paramètre quelconque ? Quelles difficultés sont introduites lorsque les calculs d'intersections de trajectoires corpusculaires sont modifiés par une perturbation du paramètre considéré ? Pour répondre à chacune de ces questions, notre réflexion s'est toujours orientée sur le formalisme intégral associé à MMC plus que sur le calcul de sensibilité lui-même. Cela nous a conduit à porter l'accent sur les travaux de formulation au cours de la présentation de MMC et à établir une correspondance entre : l'approche analogue, s'appuyant sur une description stochastique des phénomènes (où le formalisme intégral peut être occulté) et l'approche intégrale (où MMC est abordée comme une méthode de calcul intégral). Si ces deux approches sont courantes en physique, l'approche analogue est beaucoup plus généralement utilisée et les écritures intégrales sous-jacentes sont rarement explicitées, en particulier parce que les intégrales sont de dimension élevée et que leur écriture peut rapidement paraître inabordable. Partant de ce constat, nous avons présenté au paragraphe 2.2.3 une démarche, permettant d'exprimer de façon systématique une intégrale à partir d'un algorithme de Monte-Carlo. Inversement, ceci permet de gagner en souplesse lors du développement d'un algorithme à partir d'un travail d'écriture intégrale : par exemple dans le paragraphe 4.3 nous sommes résolument partis de développements intégraux pour proposer un algorithme permettant de calculer la transmission d'un signal radiatif depuis une source quasi-ponctuelle directionnelle jusqu'à un détecteur quasi-ponctuel directionnel. Si cet algorithme nécessite encore des travaux d'optimisation, il montre la possibilité d'une alternative dans les cas limites où les algorithmes analogues ont une variance infinie. Dans le cadre du calcul de sensibilités (où nous avons besoin de l'expression intégrale pour le moment de façon incontournable), nous pouvons nous appuyer sur cette dualité descriptive pour généraliser le champ d'application potentiel de la méthodologie.

Une des principales motivations de la présente étude était que des calculs de sensibilité pouvaient être rajoutés à un algorithme de Monte-Carlo existant pour un coût supplémentaire relativement faible. Les tests que nous avons menés confirment cette observation, y compris après extension de la méthode aux sensibilités à la déformation du domaine.

L'expression intégrale d'une sensibilité à la déformation du domaine peut s'obtenir par le simple ajout d'un terme supplémentaire (par rapport à une sensibilité paramétrique). Ce terme

est fonction d'un champ vectoriel appelé la vitesse de déformation du domaine. Il existe une infinité de choix de vitesses possibles pour chaque sensibilité. Un résultat important consiste à proposer une expression de vitesse applicable à tout type d'intégrales (dans le contexte de la pratique de Monte-Carlo) et assez régulière pour ne pas introduire de source de variance spécifique sur les estimations de sensibilités. Dans l'ensemble des exemples de transfert radiatif que nous avons traités, cette proposition a toujours donné des résultats satisfaisants.

Cependant, rien n'assure que la convergence du calcul de la sensibilité soit systématiquement acceptable : nous avons vu sur un exemple de sensibilité paramétrique au paragraphe 3.1.2 qu'il est tout à fait possible que les incertitudes sur les calculs d'une grandeur et de sa sensibilité soient indépendantes et que par conséquent l'erreur sur l'estimation de la sensibilité puisse être très élevé par rapport à celle sur l'estimation de la grandeur. Dans une telle situation, si dans le cas d'une sensibilité paramétrique nous sommes dans l'incapacité de remédier à cette difficulté, dans le cas d'une sensibilité à la déformation du domaine une possibilité de réflexion est ouverte par le degré de liberté que nous avons sur le choix de la vitesse de déformation. Dans le paragraphe 3.3.1, nous testons plusieurs vitesses sur un exemple de calcul de sensibilité d'un facteur de forme et l'on observe que la vitesse que nous proposons, même si elle conduit à de bonnes convergences, ne donne pas nécessairement les plus faibles incertitudes. Il serait donc intéressant d'approfondir dans ce sens la réflexion sur le choix de la vitesse.

En fin de manuscrit, nous avons essayé d'identifier les difficultés de mise en oeuvre de la méthodologie dans le cadre des transferts radiatifs et d'apporter des premières solutions effectives. Cependant, de nombreuses questions restent encore à approfondir et nous pensons notamment à celle de la mise en oeuvre d'un calcul de sensibilité dans un code numérique "imposant" où les configurations géométriques et/ou physiques sont complexes. Nous ne pouvons pas actuellement répondre catégoriquement à cette question puisque nos tests n'ont concerné que des exemples académiques mais, à partir de notre pratique (et celle de l'équipe en général), nous pouvons malgré tout émettre quelques réflexions :

- sur le calcul de sensibilités paramétriques : A de Lataillade, V. Eymet et P. Perez ont tous les trois ajouté des estimations de sensibilités paramétriques dans leurs codes respectifs (chacun de ces codes correspond à un haut niveau de complexité physique et celui de P. Perez gère plus spécifiquement des questions associées aux géométries tridimensionnelles de systèmes réels). A de Lataillade a par exemple estimé des sensibilités de bilans radiatifs à la température dans chaque maille d'un système en combustion. On notera cependant qu'il a fait le choix de concentrer son effort sur le développement d'approximations simplifiant le calcul des sensibilités¹ plutôt que d'effectuer toutes les dérivées des termes dépendant de la température. Cela montre que le développement de la sensibilité complète ne lui est pas apparu comme trivial. Nous pensons que la mise au point formelle que nous avons proposée dans ce document devrait aider au traitement de telles sensibilités paramétriques. Il se peut que les dérivées du poids et des densités de probabilités impliquent concrètement le développement de nombreux termes dérivés mais il nous semble qu'aucune difficulté spécifique n'est à attendre. Il faut souligner qu'en transfert radiatif, si les densités de probabilité d'occurrence d'un trajet optique sont fonctions des propriétés physiques telles que les coefficients d'absorption et de diffusion, la

¹Il a négligé la dépendance des propriétés optiques à la température, et n'a tenu compte que de la dépendance de la luminance de Planck dans les dérivées

température, les concentrations d'espèces etc., l'espace des chemins optique lui n'en dépend pas. En conséquence, l'estimation de sensibilité paramétrique concerne une large classe de problèmes en transfert radiatif et plus généralement en transport linéaire.

– sur le calcul de sensibilités à la déformation du domaine : nous pensons qu'il convient de distinguer deux types de sensibilités, d'une part les sensibilités à des déformations “locales” (non pas au sens géométrique du terme mais dans le sens d'une déformation concernant un sous-espace restreint de l'espace d'intégration) et d'autre part les sensibilités à des déformations “globales” (la déformation affecte l'espace d'intégration dans son ensemble).

Dans un cas local, il doit être possible de trouver un formalisme astucieux qui permette de se concentrer sur le sous-espace déformé et en conséquence de bien identifier où, dans l'algorithme, des calculs de vitesses et de dérivées doivent être ajoutés pour tenir compte de la déformation du domaine. Par exemple, un tel formalisme peut déjà s'appliquer simplement pour estimer des sensibilités à des paramètres spectraux puisqu'il suffit de choisir une formulation avec une intégration spectrale séparée d'une intégration sur l'espace des chemins optiques². Il devient alors aisément de se concentrer sur les problèmes de déformation du sous-domaine spectral sans se préoccuper de l'espace des chemins.

Dans un cas global, le domaine d'intégration dans son ensemble est déformé. Si nous nous concentrons en particulier sur les problèmes posés par la déformation de géométrie complexe (problématique du type synthèse d'image) nous pensons d'après notre pratique, que dans le principe il doit être possible de mener à terme les calculs intégraux correspondant aux sensibilités et que les convergences ont de fortes chances d'être aussi satisfaisantes que celles que nous avons observées au cours de cette thèse. Cependant, dans l'exemple du paragraphe 4.4, une déformation géométrique déformant l'espace des chemins optiques nous conduit à une expression de la sensibilité (cf équation 4.4.21) bien longue pour un cas académique. Nous pensons donc que le formalisme que nous appliquons sera alors inapproprié dès que la géométrie se complexifiera : aucune difficulté formelle n'est à attendre mais l'ampleur des écritures intégrales deviendra rapidement prohibitive. Pour ce type d'applications, il est donc certainement nécessaire de pousser plus avant la réflexion formelle, notamment en nous tournant vers les compétences existantes dans le domaine des mathématiques appliquées et de l'informatique théorique.

²Comme par exemple une intégrale du type :

$$\int_{\Delta\nu} d\nu \int_{\Gamma} d\gamma f(\gamma, \nu)$$

où Γ est l'espace des chemins optique indépendant de la fréquence, $\Delta\nu$ l'intervalle spectral étudié et f une fonction quelconque.

Annexes A

Choix du tirage aléatoire d'une position de diffusion dans le cas du problème de détection d'inhomogénéités (paragraphe 4.1)

Dans le chapitre 4, paragraphe 4.1, nous avons considéré un algorithme analogue simulant la fraction d'énergie transmise T par une couche purement diffusante soumise à un rayonnement incident collimaté. Le coefficient de diffusion de cette couche s'exprime par :

$$k_d(\mathbf{r}) = k_0 + \Delta k \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c\|^2}{v}\right) \quad (\text{A.0.1})$$

où k_0 est le coefficient de diffusion dans la couche sans hétérogénéité.

$$\Delta k \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c\|^2}{v}\right) \quad (\text{A.0.2})$$

représente cette hétérogénéité du coefficient de diffusion, distribué sous une forme gaussienne où Δk est l'amplitude de cette hétérogénéité, \mathbf{r}_c son centre et v sa variance.

Dans cette annexe, nous nous posons la question du tirage aléatoire d'une position de diffusion : ce tirage aléatoire nous permet de déterminer une abscisse curviligne σ définissant la prochaine position de diffusion du trajet optique du photon considéré. Tout au long de ce manuscrit, nous avons effectué ce tirage en fonction de la loi d'atténuation exponentielle de Beer-Lambert :

$$p_\Sigma(\sigma) = k_d(\sigma) \exp\left(-\int_0^\sigma k_d(\sigma)d\sigma\right) \quad (\text{A.0.3})$$

La fonction de répartition correspondante à cette densité de probabilité s'écrit :

$$R_\sigma = \int_0^\sigma k_d(\sigma) \exp\left(-\int_0^\sigma k_d(\sigma)d\sigma\right) = 1 - \exp\left(-\tau(\sigma)\right) \quad (\text{A.0.4})$$

où R_σ est un nombre générée dans l'intervalle $[0, 1]$. σ est alors déduit de l'équation suivante :

$$\sigma = \tau^{-1}\left(\ln(1 - R_\sigma)\right) \quad (\text{A.0.5})$$

Cependant, dans le problème considéré, l'expression de l'épaisseur optique $\tau(\sigma)$ ne peut pas être inversée analytiquement. En fonction de l'abscisse curviligne σ selon une demi-droite ayant comme origine \mathbf{r}_0 la position de diffusion précédente et comme direction \mathbf{u}_0 (la direction de propagation du photon), l'épaisseur optique s'écrit :

$$\tau = k_0\sigma + \Delta k \sqrt{\frac{\pi v}{4}} \exp\left(-\frac{d^2}{v}\right) \left[-\text{erf}\left(\frac{-l}{\sqrt{v}}\right) + \text{erf}\left(\frac{\sigma - l}{\sqrt{v}}\right) \right] \quad (\text{A.0.6})$$

où l et d sont deux distances égales à (voir la figure A.1) :

$$\begin{aligned} l &= \|\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_0\| \\ d &= \|\mathbf{r}_C - \mathbf{r}_0\| \end{aligned} \quad (\text{A.0.7})$$

où \mathbf{r}_d est la position sur l'abscisse curviligne la plus proche du point \mathbf{r}_C . Nous sommes donc

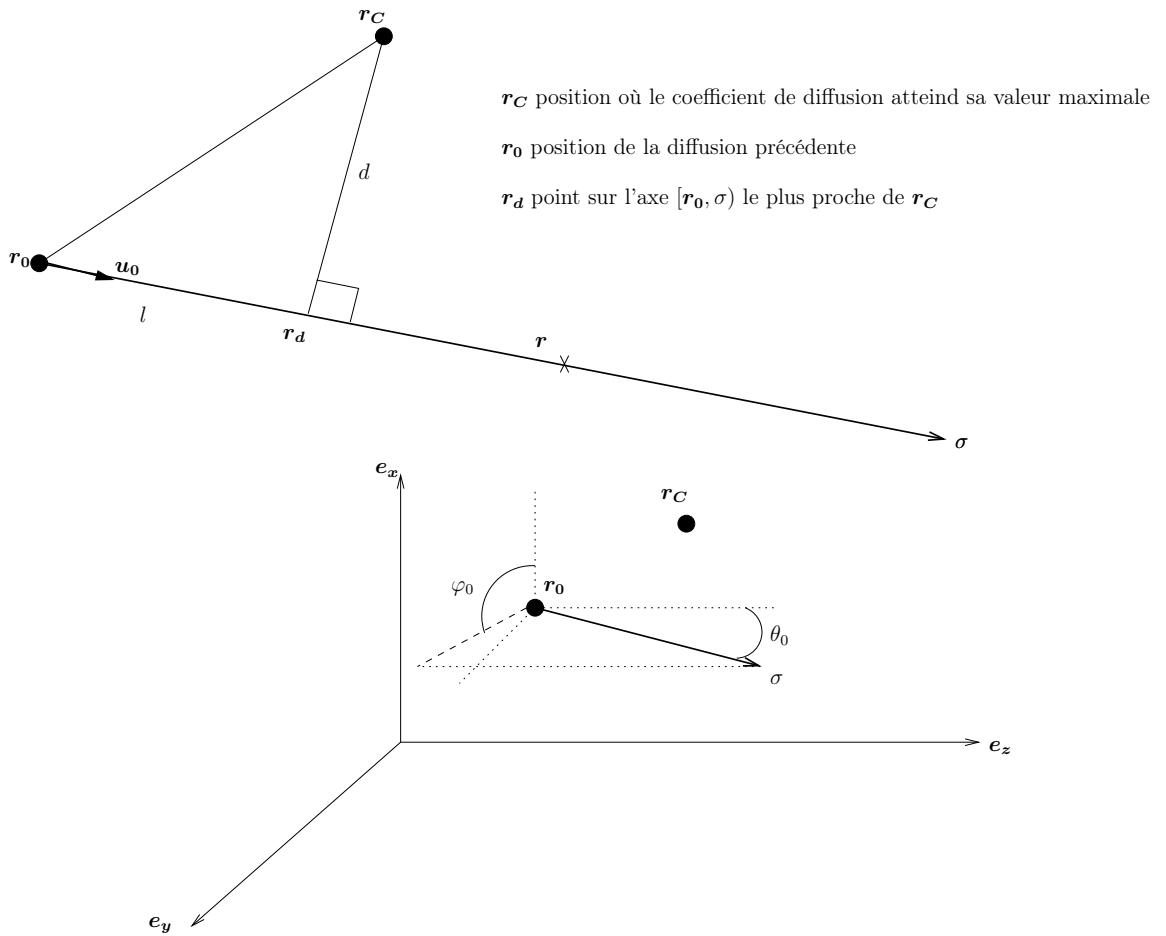


FIG. A.1 – Traitement géométrique nécessaire pour exprimer l'épaisseur optique

contraints d'utiliser une autre densité de probabilité que celle donnée par la loi de Beer en utilisant la technique d'échantillonnage préférentiel (décrise au chapitre 2, paragraphe 2.2.4). Nous avons dans cet objectif testé trois densités de probabilité différentes.

A.1 Première densité de probabilité

Nous noterons la première densité de probabilité $p_{1\Sigma}(\sigma)$ qui est égale à :

$$p_{1\Sigma}(\sigma) = ke^{-k\sigma} \quad (\text{A.1.1})$$

Cette densité de probabilité obéit à la loi de Beer-Lambert lorsque le milieu de propagation a un coefficient de diffusion homogène égal à k .

Sur la figure A.2 sont présentées des estimations de T obtenues avec cette densité de probabilité en fonction du paramètre Δk . D'après les barres d'erreurs, si l'on choisit $k = k_0$, cette

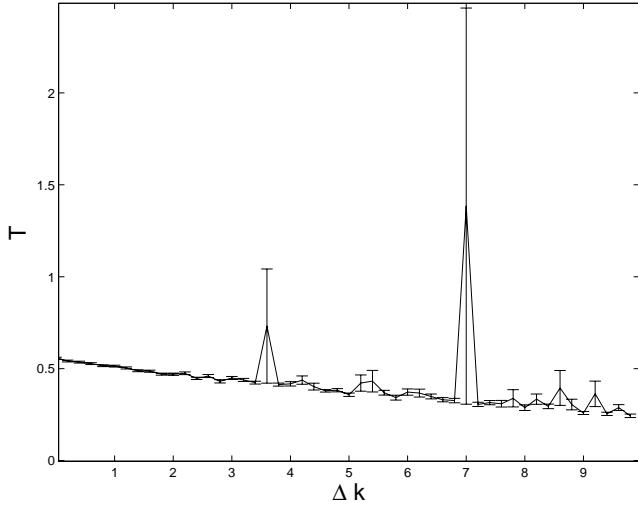


FIG. A.2 – Estimations de T en fonction de Δk avec la densité de probabilité $p_{1\Sigma}(\sigma)$. Les barres d'erreurs sont données. $k = 1$, $e = 1$, $k_0 = 1$, $v = 10^{-1}$ $\mathbf{r}_C(x_C, y_C, z_C) = (0, 0, 0.5)$ et $N = 10^5$,

densité de probabilité donne des estimations de T satisfaisantes lorsque $\Delta k < k_0$. Si l'on choisit $k = k_0 + \Delta k$, ces estimations sont satisfaisantes lorsque l'hétérogénéité est grande par rapport à l'épaisseur de la couche. Cependant, la convergence des résultats n'est pas correcte dans de nombreuses configurations paramétriques : cette densité de probabilité n'est pas satisfaisante lorsque les variations du coefficient de diffusion sont importantes.

A.2 Deuxième densité de probabilité

Nous avons alors testé une nouvelle densité de probabilité, découpée en morceau, pour mieux tenir compte des inhomogénéités de k_d . Selon la distance du point courant σ par rapport au centre de la gaussienne, la densité de probabilité s'exprime par :

$$\begin{aligned} p_{2\Sigma}(\sigma) &= k_0 \exp(-k_0\sigma) \text{ si } \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_C\|^2 > \gamma \\ p_{2\Sigma}(\sigma) &= k \exp(-k\sigma) \text{ si } \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_C\|^2 \leq \gamma \end{aligned} \quad (\text{A.2.1})$$

où γ est un critère à fixer. Cette densité de probabilité agit comme si le milieu était composé d'une hétérogénéité sphérique de centre \mathbf{r}_C , de rayon γ et de coefficient de diffusion k . Sur la figure A.3 sont présentées des estimations de T obtenues avec cette densité de probabilité en

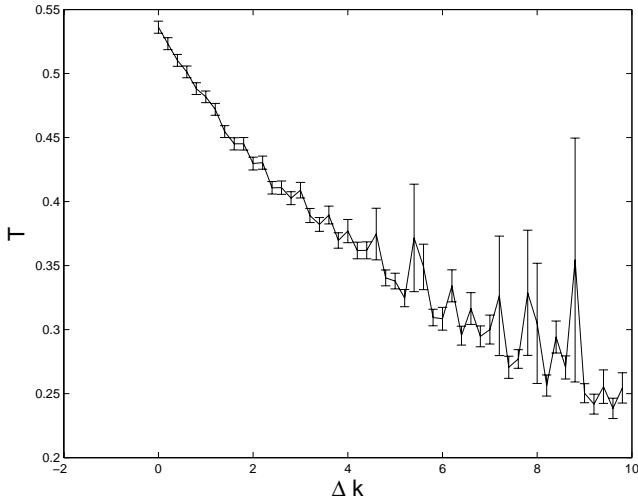


FIG. A.3 – Estimations de T en fonction de Δk avec la densité de probabilité $p_{2\Sigma}(\sigma)$. Les barres d'erreurs sont données. $k = k_0 + \Delta k$, $\gamma = v = 10^{-1}$, $k_0 = 1$, $\mathbf{r}_C(x_C, y_C, z_C) = (0, 0, 0.5)$ et $N = 10^5$

fonction du paramètre Δk . D'après les barres d'erreurs, cette densité de probabilité donne de meilleurs résultats que $p_{1\Sigma}$ mais n'est toujours pas satisfaisante lorsque Δk est important. Ceci vient du fait que cette densité de probabilité ne tient pas compte des fortes variations de k_d à l'intérieur de la sphère. En fonction du choix de k , le coefficient de diffusion à l'intérieur de la sphère sera soit surestimé (comme dans la figure A.3 où nous avons choisi $k = k_0 + \Delta k$) soit sous-estimé.

A.3 Troisième densité de probabilité

Nous avons essayé cette fois-ci de trouver une densité de probabilité qui serait la plus proche possible de la densité de probabilité analogue. La fonction erreur $\text{erf}(x)$ étant la cause de l'impossibilité d'inverser l'épaisseur optique analytiquement (voir l'équation A.0.6), nous choisissons de remplacer cette fonction erreur par une fonction $g(x)$, plus simple, qui nous permettra d'exprimer $\tau^{-1}(\sigma)$ sans difficulté. $g(x)$ est égal à :

$$\begin{aligned} g(x) &= -1 \quad \text{si } x \in]-\infty, -1] \\ g(x) &= x \quad \text{si } x \in [-1, 1] \\ g(x) &= 1 \quad \text{si } x \in [1, +\infty[\end{aligned} \tag{A.3.1}$$

$$\tag{A.3.2}$$

La figure A.4 compare cette fonction $g(x)$ et la fonction erreur. L'épaisseur optique est alors remplacée par une fonction $f(\sigma)$ égale à

$$f(\sigma) = k_0\sigma + \Delta k \sqrt{\frac{\pi v}{4}} \exp\left(-\frac{d^2}{v}\right) \left[-g\left(\frac{-l}{\sqrt{v}}\right) + g\left(\frac{\sigma - l}{\sqrt{v}}\right)\right] \tag{A.3.3}$$

Ainsi on effectue le tirage aléatoire de chaque position de diffusion en fonction de cette nouvelle densité de probabilité : $p_\Sigma(\sigma) = \frac{df(\sigma)}{d\sigma} e^{-f(\sigma)}$ où f peut être maintenant inversé. La figure A.5

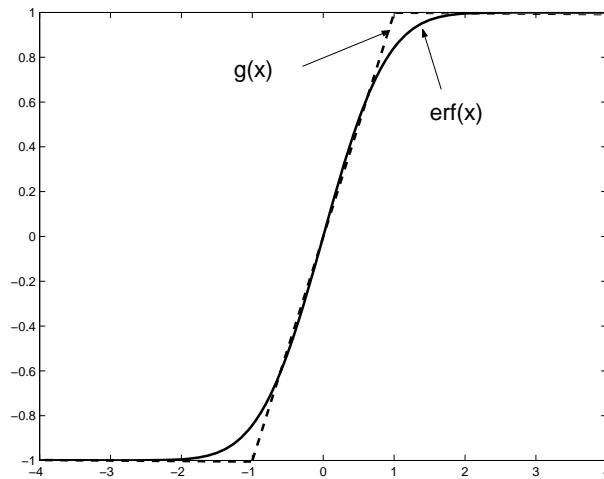


FIG. A.4 – Comparaison des tracés de $\text{erf}(x)$ et $g(x)$

montre que cette densité de probabilité est la plus efficace en terme de convergence. Les incertitudes sont d'un ordre de grandeur satisfaisant quelque soit la configuration paramétrique. Nous choisissons par conséquent de garder cette densité de probabilité dans les calculs effectuées au paragraphe 4.1.

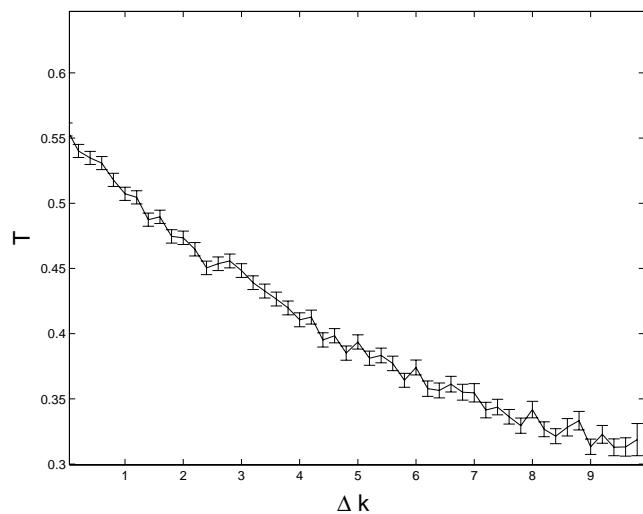


FIG. A.5 – Estimations de T en fonction de Δk avec la densité de probabilité $p_\Sigma(\sigma)$. Les barres d'erreurs sont données. $k_0 = 1$, $v = 10^{-1}$ et $N = 10^5$ les barres d'erreur sont donnés. $v = 10^{-1}$, $k_0 = 1$, $\mathbf{r}_C(x_C, y_C, z_C) = (0, 0, 0.5)$ et $N = 10^5$

Annexes B

Algorithme analogue testé dans un problème de type source-détecteur

L'algorithme de Monte-Carlo analogue choisi consiste à simuler le trajet optique de N paquets de photons. Si le paquet de photons atteint le détecteur, on tient compte de l'extinction par absorption en multipliant le poids par $e^{-k_a l}$ où l est la distance parcourue au cours du trajet optique. Cet algorithme est décrit avec plus de précision sur la figure B.1 où les densités de probabilités sont données.

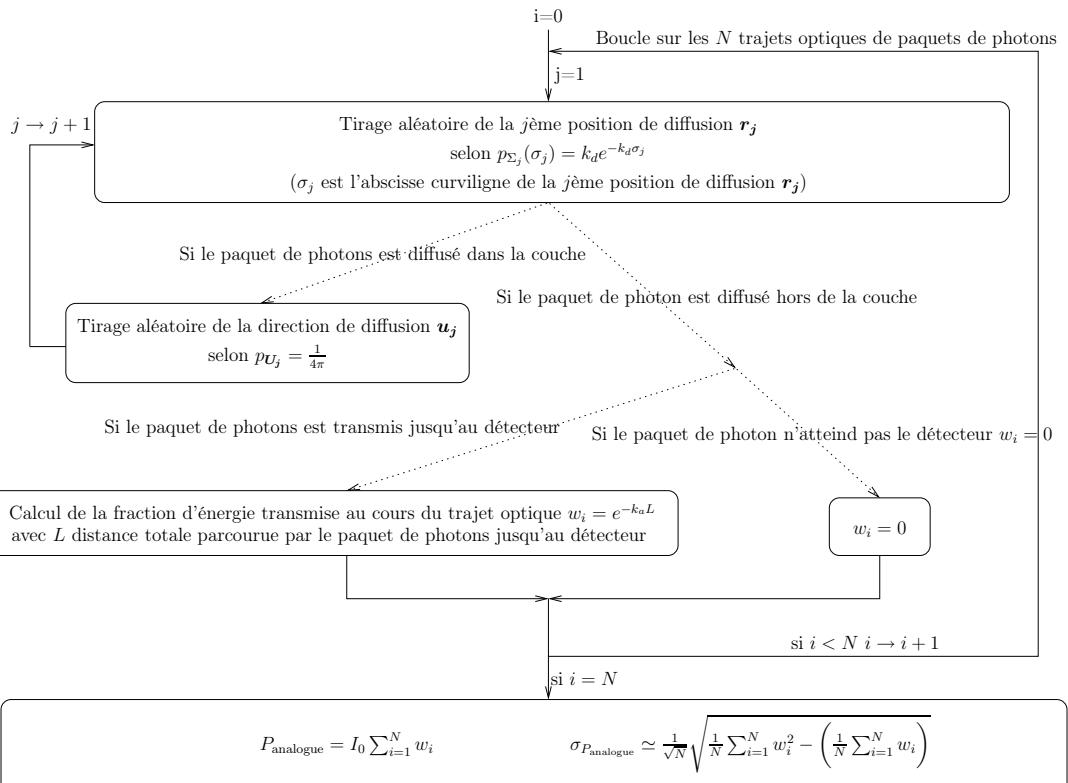


FIG. B.1 – Algorithme de MMC analogue permettant d'estimer la puissance radiative émise par une source radiative ponctuelle et directionnelle, et transmise jusqu'à un détecteur circulaire. Le milieu de propagation est absorbant et diffusant.

Bibliographie

- [1] Amaury de Lataillade. *Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans les systèmes de combustion.* PhD thesis, INP Toulouse, France, 2001.
- [2] Patrice 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.* PhD thesis, INP Toulouse, 2003.
- [3] Vincent Eymet. *Simulation Monte-Carlo et analyse en Puissance Nettées Echangées des transferts radiatifs infrarouges avec diffusion : vers une paramétrisation dans un modèle de Circulation Générale atmosphérique.* PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse, 2003.
- [4] Richard Fournier. *Rayonnement thermique dans les gaz : Analyse du couplage avec la convection naturelle.* PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse, France, 1994.
- [5] M. Cherkaoui, J.-L. Dufresne, R. Fournier, J.-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Monte Carlo simulation of radiation in gases with a narrow-band model and a net-exchange formulation. *Journal of Heat transfer*, 118 :401–407, 1996.
- [6] M. Cherkaoui, J.-L. Dufresne, R. Fournier, J.-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Monte Carlo simulation of radiation in gases with a narrow-band model and a net-exchange formulation. *Journal of Heat Transfer*, 118 :401–407, 1998.
- [7] A. de Lataillade, J.L. Dufresne, M. El Hafi, V. Eymet, and R. Fournier. A net-exchange Monte Carlo approach to radiation in optically thick systems. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 74 :563–584, 2002.
- [8] V. Eymet, R. Fournier, S. Blanco, and J.L. Dufresne. A boundary based net exchange Monte Carlo method for absorbing and scattering thick media. *Journal of quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 91 :27–46, 2003.
- [9] Yves Clergent. *Influence du rayonnement thermique sur les écoulements de convection Naturelle en Espace Confiné.* PhD thesis, INP Toulouse, France, 2000.
- [10] 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 :529–538, 2002.
- [11] K.M. Case and P.F. Zweifel. *Linear Transport Theory.* Addison-Wesley Publishing Co., Reading, 1967.
- [12] R. M. Goody and Y.L. Yung. *Atmospheric Radiation.* Oxford University Press, 1989.
- [13] Modest MF. *Radiative Heat Transfer.* McGraw-Hill, Inc, 1993.

- [14] R. Siegel and J. H. Howell. *Thermal radiation heat transfer*. Hemisphere publishing corporation, Third Edition, 1992.
- [15] R. Balian, J.F. Regg, and D. Ter Haar. *From Microphysics to Macrophysics : Methods and Applications of Statistical Physics*. Springer Verlag, 1991.
- [16] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Mécanique Quantique*. Hermann, 1998.
- [17] Jean Taine and Anouar Soufiani. Gas IR radiative properties : From spectroscopic data to approximate models. *Advances in Heat transfer*, 33 :295–409, 1999.
- [18] L. Henyey and J. Greenstein. Diffuse radiation in the galaxy. *Astrophys. Journal*, 93 :70–83, 1941.
- [19] H. C. Van de Hulst. *Light scattering by small particles*. Dover Publications, 1982.
- [20] Guo Z and Kumar S. Equivalent isotropic scattering formulation for transient short-pulse radiative transfer in anisotropic scattering planar media. *Applied optics*, 39 :4411–4417, 2000.
- [21] J. Kajiya. The rendering equation. *Computer Graphics*, 20(4) :143–150, 1986.
- [22] Cyril Caliot, Mouna El Hafi, Yannick Le Maoult, and Gilles Flamant. Etude de l'influence du rayonnement des gaz et de la diffusion sur l'émission d'un milieu diphasique à haute température. In *Acte des 12èmes Journées Internationales de Thermique*, 2005.
- [23] Cyril Caliot. *Modélisation et simulation de l'émission énergétique et spectrale d'un jet réactif composé de particules à haute température issus de la combustion d'un objet pyrotechnique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006.
- [24] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Clarendon Press, 1950.
- [25] D. Joseph, P-J. Coelho, B. Cuénot, and M. El Hafi. Application of the discrete ordinate method to grey media in complex geometries using unstructured meshes. In Eurotherm Series, editor, *Proceedings of Eurotherm 73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media*, volume 11, 2003.
- [26] David Joseph. *Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- [27] J.H. Jeans. The equations of radiative transfer problems. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, 78 :28–36, 1917.
- [28] Mengüç M.P. and Viskanta R. Radiative transfer in axisymmetric, finite cylindrical enclosures. *ASME Journal of Heat Transfer*, 108 :271–276, 1986.
- [29] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1953.
- [30] B.C. Wilson and G. Adam. A Monte Carlo model for the absorption and flux distributions of light in tissue. *Medical Physics*, 10(3), 1983.
- [31] D.V. Walters and R.O. Buckius. Monte Carlo methods for radiative heat transfer in scattering media. *Annual Review of Heat Transfer*, 5 :131–176, 1992.
- [32] www.cernlib.com.

- [33] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 90*. Cambridge University Press, 1992.
- [34] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb. *Monte Carlo Methods*. Chapman and Hall, 1964.
- [35] Basil T. Wong and M. Pinar Mengüç. Comparison of Monte Carlo techniques to predict the propagation of a collimated beam in participating media. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 42 :119–140, 2002.
- [36] K M Case. Transfer problems and the reciprocity principle. *Review of Modern Physics*, 29(4) :651–663, 1957.
- [37] D.V. Walters and R.O. Buckius. Rigorous development for radiation heat transfer in nonhomogeneous absorbing, emitting and scattering media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(12) :3323–3333, 1992.
- [38] H. Ishimoto and K. Masuda. A Monte Carlo approach for the calculation of polarized light : application to an incident narrow beam. *Journal of quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 72 :467–483, 2002.
- [39] Michael F. Modest. Backward Monte Carlo simulations in radiative heat transfer. *Journal of Heat Transfer*, 125 :57–62, 2003.
- [40] Xiadong Lu and Pei-Feng Hsu. Reverse Monte Carlo simulations of light pulse propagation in nonhomogeneous media. *Journal of quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 93 :349–367, 2005.
- [41] Gennadii A. Mikhailov. *Optimization of Weighted Monte Carlo Methods*. Springer-Verlag, 1995.
- [42] B.Hesselbo and R.B. Stinchcombe. Monte Carlo simulation and global optimization without parameters. *Physical Review Letters*, 74(12) :2151–2155, 1995.
- [43] Green J.S.A. Division of radiative streams into internal transfer and cooling to space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 15 :319–325, 1967.
- [44] H.C. Hottel and A.F. Sarofim. *Radiative Transfer*. Mc Graw-Hill, 1967.
- [45] J-L. Dufresne, R. Fournier, and J-Y. Grandpeix. Inverse gaussian k-distributions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61 :433–441, 1999.
- [46] B. Zamuner L. Tessé, F. Dupoirieux and J. Taine. Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward Monte Carlo methods and a correlated-k approach. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 45 :2797–2814, 2002.
- [47] Lionel Tessé, Francis Dupoirieux, and Jean Taine. Monte Carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 :555–572, 2004.
- [48] Francis Dupoirieux, Lionel Tessé, Sébastien Avila, and Jean Taine. An optimized reciprocity Monte Carlo method for the calculation of radiative transfer in media of various optical thicknesses. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2005.
- [49] V. Eymet, J.L. Dufresne, P. Ricchiazzi, R. Fournier, and S. Blanco. Longwave radiative analysis of cloudy scattering atmospheres using a net exchange formulation. *Atmospheric Research*, 72 :239–261, 2004.

- [50] Tomović R. *Sensitivity analysis of dynamic systems*. New-York : McGraw-Hill, 1963.
- [51] Beck J.V. and Arnorld K.J. *Parameter estimations in engineering and science*. New York : Wiley, 1977.
- [52] O. Talagrand and P. Courtier. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation i : Theory. *Quart. Roy. Met. Soc.*, 113 :1311–1328, 1987.
- [53] Pierre Bergé, Yves Pomeau, and Christian Vidal. *L'ordre dans le chaos*. Hermann, 1997.
- [54] Stéphane Blanco. *Mécanismes de séparation des protéines par électrophorèse. Modélisation et analyse de sensibilité*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse, 1996.
- [55] G.A. Mikhailov. Vector Monte Carlo methods for computing disturbances and derivatives with respect to parameters. *U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys.*, 27(5) :20–26, 1987.
- [56] Victor J. Skowronski and Joshua U Turner. Using Monte Carlo variance reduction in statistical tolerance synthesis. *Computer-Aided Design*, 29(1) :63–69, 1997.
- [57] Victor J. Skowronski. Calculating derivatives in statistical tolerance analysis. *Computer-Aided Design*, 30(5) :367–375, 1998.
- [58] Alexander Vikhansky and Markus Kraft. A Monte Carlo methods for identification and sensitivity analysis of coagulation processes. *Journal of Computational Physics*, 200 :50–59, 2004.
- [59] Maxime Roger, Stéphane Blanco, Mouna El Hafi, and Richard Fournier. Monte Carlo estimates of domain-deformation sensitivities. *Physical Review Letter*, 95(18), october 2005.
- [60] Michael Spivak. *A comprehensive introduction to differential geometry, Vol IV. Second edition*. Publish or Perish, Inc., 1979.
- [61] Edward J.Haug, Kyung K. Choi, and Vadim Komkov. *Design Sensitivity Analysis of Structural Systems*. Harcourt Brace Jovanovich, Academic Press, New York, 1986.
- [62] M. Roger, M. El Hafi, R. Fournier, S. Blanco, . A. de Lataillade, V. Eymet, and P. Perez. Applications of sensitivity estimations by Monte Carlo methods. In *Proceedings of the fourth international symposium on radiative transfer , Istanbul, Turkey*. ICHMT, june 2004.
- [63] R. Viskanta and M. P. Menguç. Radiation heat transfer in combustion systems. *Prog. Energy Combustion Science*, 13 :97–160, 1987.
- [64] M. El Hafi, A. de Lataillade, and R. Fournier. Monte Carlo sensitivity calculations applied to radiative transfer-combustion coupling. In *Proceedings of Int. Mech. Eng. Conf. and Exibition*, New Orleans, Louisiana, USA, 2002.
- [65] Yamada Y. Light-tissue interaction and optical imaging in biomedecine. *Annual Review of Heat Transfer*, 6 :1–59, 1995.
- [66] Siew Kan Wan, Zhixiong Guo, sunil Kumar, Janice Aber, and Bruce A. Garetz. Detecting inhomogeneity in a turbid medium. In *proceedings of Eurotherm73 on computational Thermal Radiation in Participating Media*, Mons, Belgium, 2003.
- [67] Champak Das, Ashish Trivedi, Kunal Mitra, and Tuan Vo-Dinh. Experimental and numerical analysis of short-pulse laser interaction with tissue phantoms containing inhomogeneities. *Applied Optics*, 42(25) :5173–5180, 2003.

- [68] Siew Kan Wan, Zhixiong Guo, Sunil Kumar, Janice Aber, and Bruce A. Garetz. Noninvasive detection of inhomogeneities in turbid media with time-resolved log-slope analysis. *Journal of quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84 :493–500, 2004.
- [69] Ashish Trivedi, Soumyadipta Basu, and Kunal Mitra. Temporal analysis of reflected optical signals for short pulse laser interaction with nonhomogeneous tissue phantoms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative transfer*, 93 :337–348, 2004.
- [70] F. Liu, K. M. Yoo, and R. R. Alfano. Ultrafast laser-pulse transmission and imaging through biological tissues. *Applied Optics*, 32(4) :554–558, 1993.
- [71] R.A. Elliot. Multiple scattering of optical pulses in scale model clouds. *Applied Optics*, 22 :2670–2681, 1983.
- [72] Kunal Mitra and James HH. Churnside. Transient radiative transfer equation applied to oceanographic lidar. *Applied Optics*, 38(1) :889–895, 1999.
- [73] Michael S. Patterson, B. Chance, and B.C. Wilson. Time resolved reflectance and transmittance for the non-invasive measurement of tissue optical properties. *Applied Optics*, 28(12), 1989.
- [74] Zaccanti G, Bruscaglioni P, Ismaelli A, Carraresi L, Gurioli M, and Wei Q. Transmission of a pulse thin light beam through thick turbid media : experimental results. *J Opt Soc Am*, 31(12) :2141–2147, 1992.
- [75] M.Q. Brewster and Y. Yamada. Optical properties of thick, turbid media from picosecond time-resolved light scattering measurements. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(14) :2569–2581, 1995.
- [76] Guo Z and Kim KH. Ultrafast-laser-radiation transfer in heterogeneous tissues with the discrete ordinates method. *Applied optics*, 42(16) :2897–2905, 2003.
- [77] Steven L. Jacques. Time resolved propagation of ultrashort laser pulses within turbid tissues. *Applied Optics*, 28(12) :2223–2229, 1989.
- [78] Yasuo Hasegawa, Yukio Yamada, Mamoru Tamura, and Yasutomo Nomura. Monte Carlo simulation of light transmission through living tissues. *Applied Optics*, 30(31) :4515–4520, 1991.
- [79] Lihong Wang, Steven L. Jacques, and Liqiong Zheng. Mcml - Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues. *Computer Methods and Program in Biomedecine*, 47 :131–146, 1995.
- [80] Pei-Feng Hsu. Effects of multiple scattering and reflective boundary on the transient radiative transfer process. *International Journal of Thermal Sciences*, 40 :539–549, 2001.
- [81] Guo Z., Aber J., Garetz B., and Kumar S. Monte Carlo simulation and experiment of pulsed radiative transfer. *JQSRT*, 73 :159–168, 2002.
- [82] Xiadong Lu and Pei feng Hsu. Reverse Monte Carlo method for transient radiative transfer in participating media. *Journal of Heat Transfer*, 126 :621–627, 2004.
- [83] Chih-Yang Wu. Propagation of scattered radiation in a participating planar medium with pulse irradiation. *Journal of quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64 :537–548, 2000.

- [84] Xiadong Lu and Pei feng Hsu. Reverse Monte Carlo method for transient radiative transfer in participating media. In *Proceeding of International Mechanical Engineering Congress, Washington D.C.* ASME, November 2003.
- [85] Guo Z., Kumar S., and San K.C. Multidimensional Monte Carlo simulation of short-pulse laser transport in scattering media. *Journal of Thermophysics Heat Transfer*, 14(4) :504–511, 2000.
- [86] Xiadong Lu and Pei feng Hsu. Reverse Monte Carlo simulations of light pulse propagation in nonhomogeneous media - part 1 : Theoretical development. In *Proceedings of the fourth international symposium on radiative transfer , Istanbul, Turkey*. ICHMT, june 2004.
- [87] Xiadong Lu and Pei feng Hsu. Reverse Monte Carlo simulations of light pulse propagation in nonhomogeneous media - part 2 :. In *Proceedings of the fourth international symposium on radiative transfer , Istanbul, Turkey*. ICHMT, june 2004.
- [88] Richard Fournier, Stéphane Blanco, and Rodolphe Vaillon. Analog versus integral formulation based Monte Carlo methods. *Personal communication*, 2005.
- [89] M.N. Ozisik and H.R.B. Orlande. *Inverse Heat Transfer*. Taylor and Francis, New York, 2000.
- [90] F.R. França, J.R. Howell, O.A. Ezekoye, and J.C. Morales. Inverse design of thermal systems. *Advances in Heat Transfer*, 36 :1–110, 2002.
- [91] K. J. Daun and J.R. Howell. Inverse design methods for radiative transfer systems. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative transfer*, 93 :43–60, 2005.
- [92] K.J.Daun, J.R. Howell, and D.P.Morton. Geometric optimization of radiative enclosures through nonlinear programming. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 43 :203–219, 2003.
- [93] K.J. Daun, D.P. Morton, and J.R. Howell. Geometric optimization of radiant enclosures containing specular surfaces. *Journal of Heat Transfer*, 125 :845–851, 2003.