



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'Institut National Polytechnique de Toulouse*
Discipline ou spécialité : *Énergétique et Transferts*

Présentée et soutenue par :
Julien Yves ROLLAND

le : 10 Novembre 2009

Titre :

Étude statistique des chemins de premier retour aux nombres de Knudsen intermédiaires : De la simulation par méthode de Monte Carlo à l'utilisation de l'approximation de diffusion

JURY

Jean-Louis DUFRESNE
Denis LEMONNIER
Gérard JEANDEL
Mouna EL HAFI
Richard FOURNIER
Simon BENHAMOU

LMD, Paris
Institut Pprime, Poitiers
LEMETA, Nancy
Centre RAPSODEE, Albi
LAPLACE, Toulouse
CEFE, Montpellier

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examinatrice
Examineur
Examineur

Ecole doctorale : Mécanique, Énergétique, Génie civil et Procédés (MEGeP)

Unité de recherche : RAPSODEE (FRE 3213)

Directeurs de Thèse : Richard FOURNIER & Mouna EL HAFI

“Non nova sed nove”
“La manière est nouvelle, mais non la matière.”

REMERCIEMENTS

Le doctorat et la rédaction d'une thèse ne sont pas exercices faciles, mon expérience n'aurait jamais été possible sans la présence et le soutien d'un grand nombre de personnes. Par ces quelques mots, j'espère vous montrer ma gratitude.

Pour commencer, je tiens à remercier Messieurs Denis Lemmonnier et Gérard Jandel de m'avoir fait l'honneur d'accepter de rapporter ce travail de thèse, envoyé de façon peu orthodoxe en deux morceaux. Mes remerciements vont aussi à Monsieur Jean-Louis Dufresne pour avoir présidé mon jury et Monsieur Simon Benhamou pour avoir accepté d'être membre d'un jury de rayonnement malgré sa spécialité de biologiste.

Si ces trois années de thèse (et un peu plus) ont été si fructueuses, l'une des principales raisons réside dans l'encadrement qui m'a été apporté. Mes remerciements vont donc tout naturellement à Madame Mouna El Hafi, qui a su être présente quotidiennement au sein de l'EMAC, Monsieur Richard Fournier dont les grandes qualités scientifiques ont nourri nos échanges et Monsieur Stéphane Blanco dont la ténacité et l'implication ont eu une grande influence sur mes travaux. Merci à vous pour avoir façonné ce doctorat en me laissant libre dans ma démarche, tout en gardant toujours en perspective sa finalité. Un remerciement particulier à Monsieur Mathias Paulin de l'IRIT pour avoir été présent quand PBRT ne semblait pas vouloir collaborer sans heurts.

Je voudrais profiter de cette occasion pour remercier toutes les personnes rencontrées au sein de l'EMAC et sur Albi, certaines le temps de la thèse, d'autres avec qui j'espère partager plus longtemps mes aventures. Tout d'abord ma collègue de bureau depuis le premier jour et dont seule la maternité a pu nous séparer : Dalila, je te souhaite une vie heureuse accompagnée de Mokrane et de ton petit bout de choux ! Merci à tous mes confrères de galère et maintenant amis proches : Christelle et Damien, Christel et Brice (et leur petit Bastien), Etienne, Laurent, Clémence et Jérémie, Ana, Fabienne et Marcio, Harona, Akrama, Renaud et Carole. Vous avez rythmé mes journées et nos discussions autour de cafés (ou thés) étaient toujours instructives et souvent amusantes. Merci aussi au personnel de l'école dont Patricia, Sylvain, Jean-Claude, Yannick, Jean-Michel, John, Ange, Elsa, Céline,... Je pourrais citer l'annuaire si je devais mentionner toutes les personnes m'ayant aidé, merci à tous !

Merci aux anciens de l'équipe "rayonneux" pour leurs avis et leur expérience : Patrice, Maxime, Cyril, Vincent, Benjamin et aux plus jeunes qui suivent la bonne direction : Jérémie, Germain et François.

Le doctorat est une expérience mais celle-ci s'inscrit dans un cadre bien plus large. Je tenais ici à remercier les amis rencontrés en fac, au lycée ou même à l'école primaire et qui m'ont toujours accompagné. Tout d'abord l'équipe des "toulousains" : Marie et Matthieu, Sandrine et Guilhem, Alban, Ariane et Fixou, vous savez tous ce que vous représentez pour moi et je ne saurai jamais assez vous remercier. Mes amis du Sud-est ensuite, qui ne comprennent pas tous pourquoi je m'entête à migrer toujours plus vers le froid du Nord, défini comme au dessus d'Aix, c'est bien connu : Loïc, Florian, Fabien, "soeurette" Cécile et Patrice, JP, Méjane, Maëva et Laurent,... Vous faites parti de ma vie depuis longtemps et j'ai la chance de retomber dans la simplicité qu'étaient nos vies à chaque fois que je vous revois, enfin, avec quelques changements pour certains (oui je parle aux parents dans la liste, ne faites pas les innocents!). Et enfin, ceux rencontrés à Orléans : Tri, Myriam, Miriam, Thierry, Stéphanie, Cristiane, Yeni, Robin, Aurélien,... Un merci tout particulier à Benoit, avec qui je travaille depuis un an mais que je considère déjà comme un ami.

Je pourrai continuer longtemps et je prie les personnes non mentionnées, mais non oubliées, de bien vouloir m'excuser.

Je terminerai ces remerciements par ma famille, qui a toujours été à mes côtés et m'a, littéralement, supporté tout au long de ces années : Laurence, Patrick et ma petite soeur Emilie. Je ne vous dis pas assez souvent combien je vous aime.

RÉSUMÉ :

Etude statistique des chemins de premier retour aux nombres de Knudsen intermédiaires : De la simulation par la méthode de Monte-Carlo à l'utilisation de l'approximation de diffusion.

Nous prenons comme point de départ un ensemble de questions soulevées par les recherches actuelles dans le domaine de l'imagerie médicale, notamment celles associées au fait qu'en présence de diffusions multiples les algorithmes de Monte-Carlo sont beaucoup trop coûteux pour être employés directement dans des algorithmes de reconstruction d'image (des algorithmes d'inversion) pour des géométries tridimensionnelles réalistes. Sur cette base, nous travaillons à la production de modèles simplifiés et nous nous concentrons plus particulièrement sur les difficultés associées à la représentation simplifiée de la statistique des chemins optiques de multi-diffusion. Plus précisément, nous étudions des trajectoires de premier retour à la frontière, c'est à dire que nous considérons des photons qui entrent dans un domaine depuis sa frontière, qui se propagent dans le domaine en subissant des diffusions successives, et nous les suivons jusqu'à leur sortie du domaine (leur premier retour à la frontière).

Dès que la taille du système considéré est grande devant la distance moyenne entre deux diffusions (dès que le nombre de Knudsen est faible devant l'unité), la technique la plus communément employée pour représenter simplement la statistique des chemins de multi-diffusion est l'approximation de diffusion. Cependant, cette approximation n'est pas valable pour les chemins optiques correspondant à des photons ne subissant que quelques diffusions (les photons courts) et les photons courts sont nombreux dans les problèmes de premier retour. Ces problèmes sont donc difficiles à aborder. Toutefois, il a été montré récemment que dans certaines conditions les problèmes de premier retour pouvaient être remplacés par des problèmes équivalents plus simples, dits de premier passage, c'est à dire dans lesquels les photons partent de l'intérieur du domaine et sont suivis jusqu'à leur sortie du domaine (leur premier passage à la frontière). Cette observation permet d'envisager des applications intéressantes étant donné que l'utilisation de l'approximation de diffusion ne pose aucune difficulté pour les problèmes de premier passage. Le fait de pouvoir considérer ces problèmes équivalents rend donc possible la simple utilisation de l'approximation de diffusion pour aborder des problèmes où à la fois l'éclairage et la mesure se font depuis l'extérieur du domaine.

Dans le présent travail, cette idée est explorée en détail, à travers notamment un ensemble de simulations numériques de type Monte-Carlo, puis plus théoriquement en analysant ces statistiques de chemin depuis les très faibles nombres de Knudsen, où la technique assure de très bons niveaux de précision, jusqu'à des nombres de Knudsen intermédiaires (c'est à dire lorsque la taille du système n'est que quelques fois supérieure au libre parcours moyen de diffusion). Nous aboutissons à la proposition d'un modèle assurant un bon niveau de précision, pour une large plage de valeurs du nombre de Knudsen, en ce qui concerne l'évaluation des moments de la distribution des longueurs de chemin. Ce modèle est d'abord validé en géométrie mono-dimensionnelle, c'est à dire dans des cas où la résolution de l'équation de diffusion peut être faite ana-

lytiquement. Son application à des géométries complexes passera par une résolution numérique de l'équation de diffusion et un premier test de faisabilité est proposé dans le cas d'une géométrie cubique, indiquant qu'aucune difficulté supplémentaire significative n'est associée aux aspects numériques. Nous discutons enfin de l'ensemble du chemin restant à parcourir en vue du traitement effectif de géométries tridimensionnelles réalistes.

Table des matières

Glossaire	xi
1. Introduction	1
2. Problème de premier retour et approximation de diffusion	7
2.1. Propagation en milieu aléatoire : l'interaction rayonnement matière . . .	8
2.1.1. Émission et absorption	9
2.1.2. Diffusion	10
2.1.3. Grandeurs caractéristiques du transport	11
2.2. Équation de transfert radiatif	16
2.2.1. Grandeurs descriptives	16
2.2.2. Équation de transfert radiatif	17
2.2.3. Marche aléatoire en biologie	22
2.3. Solutions approchées de l'ETR	23
2.3.1. Faible épaisseur optique de diffusion	23
2.3.2. Forte épaisseur optique de diffusion	24
2.4. Modélisation des problèmes de premiers retours	32
2.4.1. Caractéristiques de modélisation des premiers retours	32
2.4.2. Des solutions disponibles	33
3. Réécriture des problèmes de premier retour	37
3.1. Invariance de la moyenne des longueurs des chemins de premiers retour : $\langle L \rangle = 4V/S$	37
3.2. Reprises et extensions	41
3.3. Moyenne d'une fonction $f(L)$ en fonction des chemins de type R	44
3.4. Application à un monôme de degré n	45
3.5. Mise en oeuvre de l'approche dans un cas monodimensionnel	47
4. Monte-Carlo, outil de référence	49
4.1. Présentation théorique : Quelques éléments de mathématiques	49
4.1.1. Différentes fonctions caractérisant une variable aléatoire sur \mathbb{R}	50
4.1.2. Analyse d'un processus aléatoire	51
4.1.3. Réalisations d'une variable aléatoire	53
4.2. Approche analogue	55
4.2.1. Direction d'émission	56
4.2.2. Distance inter-diffusion	56
4.2.3. Direction de diffusion	56

4.2.4.	Test de sortie	57
4.2.5.	Algorithme analogue	57
4.3.	Approche intégrale	57
4.3.1.	Calcul intégral	58
4.3.2.	De l'approche analogue à l'approche intégrale	61
4.3.3.	Optimisation des tirages et échantillonnage préférentiel	62
4.4.	Calculs de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo	63
4.4.1.	Sensibilités paramétriques	64
4.4.2.	Sensibilités au domaine	65
4.5.	Géométries complexes et synthèse d'image	67
4.5.1.	Outils de synthèse d'image utilisés pour la simulation des trans- ferts radiatifs	68
4.5.2.	Notion de voxel	69
4.5.3.	Techniques d'accélération	70
4.5.4.	PBRT	71
4.6.	Problèmes de premier retour traités par la MMC	72
4.6.1.	Diffusion 3D dans une géométrie 1D symétrique : le slab	73
4.6.2.	Diffusion 3D dans une géométrie 3D symétrique : le cube	75
5.	Étude de la statistique de premier retour aux Kn intermédiaires	79
5.1.	Solution analytique du problème de premier retour en mono-dimensionnel pur (la ligne)	81
5.2.	Expression polynomiale en dimension quelconque	84
5.3.	Construction numérique des polynômes à l'aide de la MMC	86
5.3.1.	Principe de la méthode	86
5.3.2.	Mise en oeuvre sur la couche mono-dimensionnelle	87
5.4.	Utilisation de l'approximation de diffusion	94
5.4.1.	Mise en évidence et analyse de l'erreur associée à l'approxima- tion de diffusion avec densité nulle à la frontière	94
5.4.2.	Proposition de correction de la condition à la paroi	97
5.4.3.	Synthèse de la démarche de modélisation proposée pour le mo- ment d'ordre n	100
5.5.	Mise en oeuvre sur la ligne	101
5.6.	Mise en oeuvre sur le slab	102
6.	Vers des géométries plus réalistes	109
6.1.	Mise en oeuvre numérique sur un cas mono-dimensionnel	110
6.1.1.	Évaluation du coefficient $\beta_{n-1,n}$	110
6.1.2.	Évaluation numérique des coefficients polynomiaux	111
6.2.	Application dans le cas d'une géométrie 3D : le cube	112
6.2.1.	Construction numérique sur la base de simulation par la MMC .	113
6.2.2.	Construction numérique par la diffusion Milne	114
6.2.3.	Comparatif des différentes méthodes d'évaluation	115
6.3.	Conclusion	116

7. Conclusion et perspectives	119
A. Résolution de l'équation de la chaleur avec condition P1	121
A.1. Mise en équation	121
A.2. Résolution pour l'évaluation de $\langle L^3 \rangle$	122
Table des figures	125
Liste des tableaux	127
Bibliographie	129

Glossaire

Notation	Description	
$\partial_b I$	Sensibilité d'une grandeur I au paramètre b	64
α_n	Paramètre géométrique coefficient du monôme dominant de $\langle L^n \rangle$	46
$\beta_{i,n}$	Coefficients du monôme d'ordre i dans un polynôme d'ordre n	85
χ	Coefficient correcteur	31
$\Delta\tau$	Pas de temps	110
$\Delta x / \Delta y / \Delta z$	Pas d'espace	110
$\delta(x - x_0)$	Fonction de Dirac	95
ϵ	Terme source radiatif interne	21
ϵ_{ri}	Terme source radiatif diffusé	21
λ_p	Longueur d'onde	10
ν	Fréquence	9
Ω	Nom général affecté à un volume	23
$\partial\Omega$	Nom générale affecté à une frontière	23
ω	Albédo de diffusion simple	15
Φ	Fonction de phase de diffusion	13
$\Phi_L(t)$	Flux total sortant dans un problème de premier retour	82
$\Phi_R(t)$	Flux total sortant dans un problème de premier passage	82
Φ_{HG}	Fonction de phase d'Henye et Greenstein	18
Ψ_ν	Puissance nette échangée (monochromatique)	41
ϕ	Angle zénithal	53
$\phi(\mathbf{x}\tau)$	Densité de flux à la paroi	34
ϕ_e/ϕ_s	Flux surfacique entrant/sortant	11
ρ	Densité de particules	33
σ	Section efficace	12
σ_X	Écart-type de la variable aléatoire X	52

Notation	Description	
σ_i	Distance entre deux diffusions (Uniquement en 4.2)	56
τ	Temps adimensionnel	46
τ_a	Épaisseur optique d'absorption	14
τ_s	Épaisseur optique de diffusion	13
τ_+/τ_-	Temps caractéristiques	28
θ	Angle azimutal	53
a	Taille caractéristique d'une particule	10
B_i	i -ième nombre de Bernoulli	87
c	Vitesse de la lumière	16
c_0	Vitesse de la lumière dans le vide	16
D	Coefficient de diffusion macroscopique	27
E	Longueur caractéristique 1D	33
E_i	Niveau d'énergie i d'une molécule	9
$\mathbf{E}(\mathbf{X})$	Espérance de la variable aléatoire X	51
F_{dn}	Composante normale du vecteur densité de flux radiatif diffus	30
F_{dt}	Composante tangentielle du vecteur densité de flux radiatif diffus	30
\mathbf{F}_d	Vecteur densité de flux radiatif (contribution diffuse)	29
\mathbf{F}	Vecteur densité de flux radiatif	29
f^0	Distribution d'équilibre des photons	25
f^+/f^-	Fonction de densité en sens positif/négatif dans la description d'un problème de premier retour en 1D pur	81
f_ν	Fonction de distribution monochromatique	16
f_v	Fraction volumique	10
g	Facteur d'anisotropie	13

Notation	Description	
g^+/g^-	Fonction de densité en sens positif/négatif dans la description d'un problème de premier passage en 1D pur	82
$\widetilde{g}^+/\widetilde{g}^-$	Transformée de Laplace de la fonction de densité g^+/g^-	83
$H()$	Fonction Heaviside	22
h	Constante de Planck	9
\hat{I}	Estimateur de l'intégrale I	59
\mathbf{j}	Vecteur densité de flux de photons	25
K_n	Nombre de Knudsen	85
k	Coefficient d'extinction	15
k^*	Inverse du libre parcours moyen de transport l^*	28
k_B	Constante de Boltzmann	17
k_a	Libre parcours moyen d'absorption	15
k_s	Coefficient de diffusion	12
$\langle L \rangle$	Valeur moyenne de la longueur des chemins de premier retour	4
$\langle L^n \rangle$	Moment d'ordre n de la longueur des chemins de premier retour	45
L_i	Luminance émise ou transmise en un point	23
L_ν	Luminance (monochromatique)	16
L_ν^0	Luminance d'équilibre	17
L_d	Luminance diffuse	21
L_{ri}	Luminance incidente réduite	20
l^*	Libre parcours moyen de transport	14
l_a	Libre parcours moyen d'absorption	14
l_s	Libre parcours moyen de diffusion	12
m_r	Rapport normalisé de masse restante dans un système diffusif et critère d'arrêt	110

Notation	Description	
N	Nombre de particules/photons	15
N	Nombre de réalisations	55
\mathbf{n}	Vecteur normal sortant	22
\tilde{n}_{cible}	Densité surfacique	12
n	Densité de photons (Uniquement en 2.3.2)	25
n	Indice de réfraction (Uniquement en 2.2.1)	16
n	Ordre polynomial	45
n^0	Densité d'équilibre de photons	25
n_{cible}	Densité volumique	11
p'_R	Dérivée de la fonction de densité de probabilité p_R	44
$p_L(l)$	Fonction de densité de probabilité des longueurs de chemin de premier retour	40
$p_R(r)$	Fonction densité de probabilité des chemins de premier passage	43
p_R^{diff}	Fonction de densité de probabilité de la longueur des chemins de premier passage issue d'une approximation de diffusion	45
$p_T^{diff-P1}(t)$	Fonction de densité de probabilité des temps de résidence sous approximation de diffusion avec condition P1 aux bords	99
$p_T^{diff}(\tau)$	Fonction de densité de probabilité des temps de résidence τ sous l'approximation de diffusion	46
$\mathbf{Q}_1(\mathbf{x})$	Coefficient source normal	31
q	Paramètre de dimension physique des marches aléatoires	34
R	Longueur de chemins de premier passage	43
$R^{diff-P1}$	Variable aléatoire associée aux chemins de premier passage traité par une approximation de diffusion avec condition P1 aux bords	98
R^{diff}	Longueur de chemins de premier passage sous l'approximation de diffusion	45

Notation	Description	
$\langle (R^{diff})^n \rangle$	Moment d'ordre n de la longueur des chemins de premier passage sous l'approximation de diffusion	45
r	Abscisse curviligne	19
S	Surface d'une frontière	4
$S(\mathbf{u}_i \sigma_i \mathbf{x}_i)$	Fonction test de non-sortie	57
$T(\mathbf{u}_i \sigma_i \mathbf{x}_i)$	Fonction test de sortie	57
T_X	Température	39
\mathcal{T}	Distance optique de transport	19
t	Temps	46
U	Luminance moyenne	28
\mathbf{u}	Vecteur direction de propagation	16
u	Épaisseur optique de diffusion	86
V	Volume	4
\mathbf{V}	Vecteur vitesse moyenne	25
v	Vitesse de particules	45
\mathbf{x}	Vecteur position	16
x_p	Paramètre de taille	10

Chapitre 1.

Introduction

La question que nous nous posons dans ce travail de thèse peut paraître très théorique, mais en réalité nous aurons essentiellement en tête une image physique et un domaine d'application : il s'agira de la propagation de photons dans un milieu très diffusant et des applications correspondant aux techniques d'imagerie médicale.

Très brièvement, on peut retenir que les techniques d'imagerie médicale les plus couramment employées cliniquement, sont des techniques qui sont essentiellement fondées sur le fait que les phénomènes de diffusion multiple peuvent être négligés. Du point de vue des médecins, il reste très utopique d'espérer reconstruire une image à partir d'un signal optique correspondant à des photons ayant vécu plus d'une diffusion. Bien sûr, la communauté médicale connaît l'existence des différents travaux de la communauté radiative dans lesquels on parvient par inversion à reconstruire les propriétés optiques de milieux diffusants à partir de signaux optiques extérieurs, notamment tous ceux qui ont pu être menés dans le domaine de l'observation satellitaire de l'atmosphère terrestre, en particulier des nuages. Mais il reste aujourd'hui un cap important à franchir avant que de telles techniques soient exploitables dans le contexte très exigeant de la pratique clinique.

Et pourtant, de très nombreux travaux de recherche ont été lancés dans les dix dernières années et les espoirs sont sérieux de voir l'ensemble de ces efforts aboutir. Une des très grosses motivations de tels travaux est la volonté de trouver un moyen d'exploiter pleinement la plage fréquentielle appelée communément la fenêtre thérapeutique. Il s'agit d'une plage de fréquence dans le très proche infrarouge dans laquelle les tissus humains sont très peu absorbants et donc dans laquelle les photons peuvent pénétrer aisément à l'intérieur des tissus. Le gros avantage de cette fenêtre de fréquence par rapport à beaucoup de celles employées dans le domaine médical, c'est qu'elle correspond à des photons d'énergie non nocives pour les tissus contrairement, par exemple, aux rayons X. Les techniques médicales qui parviendraient à exploiter cette fenêtre pourraient paraître aussi anodines que l'expérience bien connue de l'application d'une lampe électrique sur la paume de la main et l'observation de la lumière traversant la main ou rétrodiffusée autour de la lampe (une lumière rouge car le rouge est la fréquence la plus proche de la fenêtre de faible absorption dont nous parlons). Elles pourraient également être très peu coûteuses, sauf bien sûr si il est nécessaire de travailler en instationnaire à l'aide de pulses de lumière de très faible durée (mais même dans ce domaine les coûts des sources et de capteurs sont en continuelle diminution).

On pourrait donc voir émerger une pratique de diagnostics médicaux très fréquents, voire d'auto-diagnostics, autorisés par la non nocivité et les faibles coûts.

Seulement voilà : dans cette fenêtre thérapeutique, les photons diffusent fortement ... À travers la paume de la main, on ne reconnaît plus la forme de la lampe, on reçoit seulement des photons dont on imagine mal au premier abord comment ils peuvent servir à reconstruire une image, ni de la lampe, ni d'une éventuelle hétérogénéité des propriétés optiques au sein de la main. L'enjeu est là : peut-on espérer reconstruire une image d'une hétérogénéité au sein d'un tissu à partir de signaux optiques ayant vécu entre quelques et quelques dizaines de diffusion ? Les axes de recherche motivés par cette question sont très nombreux et très divers, depuis des approches purement cliniques jusqu'à des réflexions très théoriques sur la diffusion multiple et les techniques d'inversion, et je ne me lancerai pas dans une tentative de description exhaustive. Mais il y a un point essentiel sur lequel nous devons insister pour fixer le contexte du présent travail de recherche : pour que de telles techniques puissent être exploitables cliniquement, il est nécessaire que les temps de calcul associés au modèle direct et à procédure d'inversion soient compatibles avec une utilisation en temps réel.

Ce point suffit à définir le cadre de nos réflexions : en supposant connues les propriétés optiques des tissus et des hétérogénéités recherchées, pouvons nous concevoir des techniques de simulation numérique rapides, en diffusion multiple, pour des géométries tridimensionnelles, qui puissent être la pierre de base de techniques d'inversion itératives (plusieurs calculs directs étant nécessaires pour reconstruire l'image à partir des signaux disponibles) ?

Bien sûr, une fois que cette question est posée, plusieurs pistes de recherches se présentent. Il y a en particulier celle de l'accélération purement informatique des techniques de calcul. Sur ce terrain, il est important de mentionner que des équipes d'informaticiens travaillent aujourd'hui à partir de l'enchaînement d'idées suivantes : lorsqu'il est question de diffusion multiple en géométrie tridimensionnelle complexe, la méthode numérique la plus couramment employée est la méthode de Monte-Carlo ; une piste est donc de travailler à une très forte accélération des algorithmes de Monte-Carlo en géométrie complexe de façon à les rendre compatibles avec du calcul temps réel sur des calculateurs usuels. Ces travaux s'inspirent des recherches théoriques les plus récentes dans le domaine de la synthèse d'image, ainsi que des possibilités de parallélisation intensive offertes par les architectures des processeurs graphiques de nouvelle génération (possibilités de parallélisation intensive sur un seul PC usuel). Les autres pistes correspondent à la recherche de nouveaux modèles physiques (issus de l'équation de transfert radiatif supposée valide) adaptés à l'étude des phénomènes de diffusion multiple dans les conditions spécifiques décrites ci-dessus (c'est à dire pour des épaisseurs optiques de diffusion allant de quelques unités à quelques centaines).

Nous nous plaçons sur ce dernier terrain. Or, de ce point de vue, la première image physique qui vient à l'esprit est celle correspondant à l'approximation de diffusion. En effet, les exemples sont très nombreux dans la littérature du transfert radiatif où la représentation du rayonnement à l'aide d'une loi de diffusion de type fickienne (ou

approximation de Rosseland¹) est très pertinente à partir d'épaisseurs optiques de quelques unités. Les applications médicales auxquelles nous pensons sont donc des applications pour lesquelles l'approximation de diffusion est un très bon candidat lorsqu'il est question de représenter simplement le rayonnement et mettre en oeuvre des techniques numériques très rapides. A quelques exceptions près [6], nous pouvons même affirmer que la quasi totalité des études actuelles partent de l'approximation de diffusion, en constatant que la résolution numérique de l'équation de diffusion en géométrie tridimensionnelle représente à peu près le coût numérique maximum envisageable en vue de l'inversion [7]. Nous devons donc envisager de travailler avec l'approximation de diffusion, ou bien avec des approximations d'un niveau comparable. Or il apparaît une difficulté tout à fait particulière lorsque l'on cherche à étudier des problèmes de transferts où l'éclairage se fait depuis l'extérieur du système et où les capteurs sont également placés à l'extérieur du système. Dans ce cas, un grand nombre de photons peuvent ressortir du système après un faible nombre de diffusions, or pour ces photons ne vivant que peu de diffusions l'utilisation d'une loi fickienne n'est pas pertinente : il faut un grand nombre de diffusions pour que l'approximation de diffusion soit valable. Bien entendu, cette difficulté disparaît si la source est placée à l'intérieur du système, suffisamment loin de la frontière. En effet, si les capteurs sont toujours placés à l'extérieur, la distance minimum parcourue par les photons depuis la source vers le capteur est telle que tous les photons vivent un nombre élevé de diffusions et l'approximation de diffusion est valable. Cependant les techniques d'imagerie médicale correspondantes demandent une procédure intrusive permettant l'émission de photons depuis l'intérieur des tissus (injection de fluorophores, par exemple) et on perd une partie des intérêts de la fenêtre thérapeutique en termes d'absence de nocivité et simplicité des procédures. Par ailleurs, même en conservant les sources et les capteurs à l'extérieur du domaine, on peut contourner les problèmes mentionnés ci-dessus en écartant les sources et les capteurs de façon à s'assurer que tout photon parvenant aux capteurs ait vécu un nombre suffisant de diffusions. La conséquence est que l'on perd la possibilité d'exploiter toute une partie du signal optique ressortant du système, ce qui est handicapant face à un problème théorique où l'on cherche justement à faire la preuve que, malgré la diffusion multiple, le signal disponible contient suffisamment d'informations pour qu'il soit envisageable de reconstruire une image de l'intérieur du domaine.

Dans le présent travail, nous explorons la possibilité de ne pas contourner cette difficulté et de développer des modèles physiques aussi performants que la diffusion fickienne, voire d'utiliser autrement la diffusion fickienne, malgré la présence de photons n'ayant vécu qu'un faible nombre de diffusions. Bien sûr, nous ne nous posons pas cette question dans toute sa largeur. Nous nous concentrons sur la question théorique telle qu'elle se pose à partir des applications médicales que nous venons de

1. L'approximation de Rosseland n'est pas strictement équivalente à l'approximation de diffusion mais toutes deux se retrouvent à l'aide d'une loi de Fick reliant flux radiatif local et température locale

décrire, c'est à dire que nous cherchons à traiter une famille de problèmes physiques dans lesquels des particules seront incidentes à la frontière d'un domaine donné et seront suivies le long de leurs trajectoires jusqu'à ce qu'elles ressortent du système. Afin d'énoncer plus précisément encore notre objectif de travail, posons sommairement quelques mots de vocabulaire que nous préciserons par la suite : Nous parlerons tout d'abord de "chemins courts" pour les trajectoires de photons n'ayant vécu qu'un faible nombre de diffusions, c'est à dire pour les photons échappant à l'approximation de diffusion. Nous parlerons ensuite de "trajectoires de premier passage" pour des trajectoires de photons depuis un point dans le domaine jusqu'à leur première traversée de la frontière du domaine (jusqu'à leur sortie à travers une paroi non réfléchissante). Puis nous parlerons de "trajectoires de premier retour" pour des trajectoires de photons partant de la frontière, entrant dans le domaine et se propageant dans le domaine jusqu'à leur première traversée de la frontière du domaine (jusqu'à leur sortie). Avec ce vocabulaire, nous pouvons dire que les problèmes de premier retour sont difficiles à traiter à l'aide de l'approximation de diffusion car les photons courts jouent un rôle important et qu'ils échappent à l'approximation de diffusion. Nous étudierons ces problèmes de premier retour en essayant de les remplacer par des problèmes de premier passage "équivalents" et en leur appliquant l'approximation de diffusion. En tant que telle cette idée avait déjà été énoncée dans [5], mais d'une part nous en évaluons plus précisément la portée réelle et d'autre part nous en proposons une extension permettant d'atteindre des niveaux de précision nettement supérieurs pour des systèmes d'épaisseurs optiques "intermédiaires", c'est à dire précisément celles rencontrées dans le domaine médical.

Avant de rentrer dans le coeur de ce travail, nous allons énoncer une propriété physique simple qui est à l'origine de l'ensemble des orientations de recherche que nous avons choisies. Il s'agit d'un problème de premier retour tout à fait particulier où les photons entrent uniformément à la frontière du domaine avec des directions d'incidences isotropes sur l'hémisphère (éclairage uniforme et isotrope). Dans une telle configuration, en supposant le milieu non absorbant, il a été montré que la valeur moyenne des longueurs des chemins de multi-diffusion jusqu'à la sortie (longueur moyenne des chemins de premier retour à la frontière) est égale à $\langle L \rangle = 4V/S$ où V est le volume du domaine et S la surface de sa frontière. On voit que cette grandeur est purement géométrique. Elle est donc indépendante des propriétés de diffusion du milieu, qui peuvent en particulier être hétérogènes. Cela signifie notamment que si l'on imagine que l'on augmente le pouvoir de diffusion du milieu (si on réduit le libre parcours moyen de diffusion), cette longueur moyenne va rester invariante. Il va donc y avoir une compensation stricte entre la façon avec laquelle les chemins courts vont être modifiés et la façon avec laquelle les "photons longs" vont l'être. Or, pour les photons longs, nous pouvons employer l'approximation de diffusion. En retour, indirectement, on voit ainsi que l'approximation de diffusion appliquée aux chemins longs peut nous donner des informations sur la statistique des chemins courts : les chemins courts pourraient être abordés grâce à l'utilisation conjointe de l'approximation de diffusion sur les chemins longs et de la propriété d'invariance existant sur la statistique totale

(chemin courts plus chemins longs).

Une fois nos orientations énoncées théoriquement de cette façon, il est facile de voir que les questions que nous abordons concernent également des objets d'études très différents de l'application médicale que nous avons mise en avant au début de cette introduction. Le sondage satellitaire des nuages atmosphériques est bien sûr une application très voisine et il existe de nombreuses fréquences et configurations pour lesquels les épaisseurs optiques de diffusion des nuages sont comparables à celles des systèmes médicaux décrits ci-dessus (que ce soit les nuages terrestres ou les nuages présents sur d'autres atmosphères planétaires). Certains problèmes de neutronique sont également très voisins [30]. Mais nous mentionnerons aussi des applications très différentes, ne serait-ce que parce qu'elles sont à l'origine de l'identification de la propriété d'invariance que nous venons d'énoncer : il s'agit de l'étude de comportements collectifs dans les sociétés animales. En particulier, le déplacement des insectes est souvent modélisé à l'aide de trajectoires de multi-diffusion et des questions très comparables se posent concernant l'analyse statistique des chemins de premier retour.

La suite du document est organisée de la façon suivante :

- Dans le chapitre 2, nous posons le problème à l'origine de cette thèse en nous plaçant résolument dans le cadre de la physique du transfert radiatif en présence de diffusion multiple. De rapides mentions sont faites permettant d'établir des liens directs avec d'autres phénomènes de transport linéaire. Nous définissons les problèmes statistiques de premier retour que nous considérons plus spécifiquement dans les chapitres suivants et nous passons en revue les techniques usuelles liées à l'approximation de diffusion telles qu'elles peuvent être mises en oeuvre pour étudier de tels problèmes à la limite des faibles nombres de Knudsen. Nous en illustrons rapidement les limites de façon à bien faire sentir les problèmes restant ouverts dans le domaine.
- Dans le chapitre 3, nous résumons l'ensemble des travaux menés récemment à partir de la propriété d'invariance mentionnée ci-dessus. Nous rappelons précisément le sens et le domaine de validité de $\langle L \rangle = 4V/S$, puis nous en donnons une démonstration simplifiée. Nous passons ensuite en revue les travaux au cours desquels cette propriété a été reprise comme telle, ou étendue, en insistant plus particulièrement sur l'extension aux moments d'ordres supérieurs qui est le véritable point de départ du présent travail.
- Dans le chapitre 4, nous rappelons les fondements de la méthode de Monte-Carlo. La raison de ce chapitre est double : Tout d'abord, la méthode de Monte-Carlo sera intensément employée par la suite pour valider les développements théoriques proposés, et elle le sera sous des formes parfois non usuelles, en particulier avec des calculs de sensibilités non triviaux (sensibilités aux paramètres de diffusion intervenant dans les lois statistiques de génération des chemins de multi-diffusion). Ensuite, il est probable que tous les travaux à venir dans lesquels on cherchera à employer des approximations de type "diffusion macroscopique" pour mettre en place des algorithmes d'inversion en géométrie complexe (notamment dans le contexte médical) devront, dans un premier temps, être validés à l'aide d'algorithmes de Monte-Carlo. Or cet exercice de validation est en tant que tel une

source de difficulté dès lors que l'on considère des systèmes d'épaisseur optique importante. Le présent travail de recherche n'a donc du sens que si il est étroitement relié aux travaux actuels concernant l'optimisation des algorithmes de Monte-Carlo, que ce soit dans le domaine de la Physique ou dans le domaine de l'Informatique.

- Le chapitre 5 est le coeur du présent travail. Nous faisons une proposition théorique qui étend les développements précédemment publiés concernant l'étude des moments d'ordre supérieur de la distribution des longueurs des chemins de multi-diffusion depuis la frontière jusqu'au premier retour à la frontière. Les travaux précédents aboutissaient à des expressions exactes à la limite d'un nombre de Knudsen tendant vers 0, mais nous montrons que ces expressions sont largement insuffisantes dès lors que l'on s'intéresse aux nombres de Knudsen "intermédiaires" (de 10^{-2} à quelques 10^{-1}) correspondant aux applications envisagées. Nous essayons d'analyser les raisons de ce mauvais comportement, puis nous formulons une solution alternative que nous testons sur un ensemble de configurations académiques.
- Dans le chapitre 6 nous concluons par une discussion concernant la mise en oeuvre effective de la solution précédente. Notamment, dans le chapitre 5 nous faisons appel à des solutions de l'équation de diffusion macroscopique, qui étaient toutes disponibles analytiquement (étant donné la simplicité des configurations géométriques étudiées). L'utilisation pratique de la technique proposée en dehors de ces configurations académiques demande bien sûr de partir d'une résolution numérique de l'équation de diffusion. Nous commençons donc par regarder si les imprécisions numériques sont sources de difficultés spécifiques ou si les techniques usuelles de résolution numérique de cette équation conduisent à des résultats satisfaisants. Ensuite vient la question des conditions aux limites. Les observations faites sur les géométries académiques du 5 (validité de la condition de Milne) ont-elles des chances de rester valables dans d'autres géométries? Ces questions ne sont pas abordées en toute généralité, mais une première exploration est proposée de façon à ouvrir vers l'ensemble des travaux restant à mener en vue d'une mise en oeuvre effective, notamment en termes d'inversion pour l'imagerie médicale.

Chapitre 2.

Problème de premier retour et approximation de diffusion

Les problèmes de premier passage étudiés dans le cadre de la physique statistique sont associés à un spectre d'applications très large. On les retrouve sur des problématiques de nature différentes en chimie, biologie, physique ou sciences économiques mais il existe une unité dans le questionnement qui a permis d'établir un certain nombre de résultats à portée très générale. Pour une revue détaillée de la littérature, nous renvoyons le lecteur aux ouvrages de références dans le domaine tel que [43].

Nous nous plaçons ici dans un contexte applicatif tout à fait particulier associé essentiellement aux problèmes de transferts radiatifs. Il s'agira plus particulièrement d'étudier, dans le cadre de la physique du rayonnement, des problèmes de premiers retour à la frontière du système. Les champs applicatifs sont essentiellement liés aux problèmes d'exploration de la composition d'un milieu que l'on éclaire depuis le milieu extérieur et pour lequel un jeu de capteurs récupère le rayonnement sortant qui a interagi avec la matière. Une analyse des champs radiatifs résultants permet par des méthodes inverses de remonter aux propriétés du système. Ceci se pratique couramment dans l'exploration médicale ou satellitaire avec des techniques de nature différente mais principalement basée sur les propriétés d'absorption et d'émission de la matière.

Depuis peu il est envisagé, notamment en tomographie médicale, d'explorer des tissus en présence de diffusion multiple du rayonnement. Même si la littérature fournit des premiers résultats, on est très loin d'une méthodologie efficace et les problèmes pratiques et théoriques sont nombreux. Notre travail s'inscrit dans ce cadre et le présent chapitre a pour objectif de fournir les éléments de base essentiel à la compréhension de toute la suite. Il s'agira essentiellement de rappeler les descriptions corpusculaires usuelles utilisées en transfert radiatif ainsi que les reformulations approchées de l'équation de transfert radiatif comme l'approximation de diffusion. Nous essaierons d'orienter la présentation dans le but d'éclairer la problématique des premiers retours.

2.1. Propagation en milieu aléatoire : l'interaction rayonnement matière

La propagation des ondes ou des particules dans un milieu est fortement dépendante de la nature du milieu considéré. Il existe de nombreux modèles, fonction des objectifs et des hypothèses mise en jeux. Nous intéressent à la propagation de la lumière et aux transferts radiatifs, deux approches duales sont mises à contribution : l'approche ondulatoire et l'approche corpusculaire. Quoique nécessitant toutes deux d'être prises en compte afin de décrire l'intégralité des phénomènes radiatifs, l'apport de nos travaux ne se place que dans le contexte corpusculaire. Nous ne ferons mention de l'aspect ondulatoire qu'au moment de préciser les limites et les hypothèses des modèles décrits. Les propriétés physiques et leur évolution peuvent être connues avec précision ou alors présenter de grandes variations spatiales et/ou temporelles ne permettant pas une description déterministe. Lorsque les variations sont trop fortes, partiellement connues ou trop complexes à exprimer, différentes échelles de description d'un problème peuvent être utilisées :

- L'échelle microscopique, dont l'unité de description est associée celle des particules constituant le système et dont la description passe par une expression statistique et une probabilité des états possible. L'exemple le plus courant est la description des états d'un atome.
- L'échelle macroscopique qui décrit l'évolution temporelle ou stationnaire du système dans son ensemble par l'intermédiaire de grandeur moyenne dans l'espace géométrique aboutit en général à une description déterministe.
- Entre les deux se situe l'échelle mésoscopique. Elle utilise des valeurs moyennes, héritées de la description microscopique mais est plus exhaustive que l'échelle macroscopique, conservant l'information dans l'espace des phases là où la description macroscopique se contente de l'espace physique. C'est à cette échelle que se situe la représentation mathématique des phénomènes de propagation en milieu aléatoire. L'équation de transfert radiatif résultante est issue de la théorie du transport linéaire, par opposition au transport non-linéaire où les particules suivies interagissent entre elle dans l'espace des phases. Dans ce type d'approche la description statistique du problème impose une formulation en terme de fonctions de densité de probabilité ou fonction de distribution.

L'approche mésoscopique choisie s'appuie sur un point de vue corpusculaire : ce type de description en transfert radiatif considère l'évolution de quanta élémentaires d'énergie, appelés photons, sans interaction mutuelle. Les photons interagissent donc de façon indépendante les uns des autres avec un milieu de propagation supposé fixe mais dont les composants (centres d'interaction de type diffuseurs ou absorbeurs) sont distribués de façon aléatoire dans l'espace. Mis à part le surplus d'information inhérent à l'utilisation de l'espace des phases, la description mésoscopique est en tout point comparable à la description macroscopique. Le passage d'une description dans l'espace des phases à l'espace physique, nécessite cependant de formuler une hypothèse sur la distribution des directions de propagation des particules étudiées (isotropie par

exemple) et sera présentée plus loin.

2.1.1. Émission et absorption

Dans le cadre du transfert radiatif, les photons sont des vecteurs de transmission de l'énergie entre les molécules, les différentes parties du système, etc... Parmi les processus "sources" à l'échelle élémentaire, on distingue la création de photons appelée émission et leur disparition appelée absorption. La compréhension et la quantification de ces phénomènes passe par une description des niveaux d'énergies des molécules constituant le milieu ambiant et fait appel aux théories de spectroscopie.

L'état d'excitation d'une molécule est caractérisé par le peuplement de ces niveaux d'énergie. Celui-ci est lui même décomposé en différents paliers correspondant à des processus différents : niveaux électroniques, niveaux vibrationnels et niveaux rotationnels (cf. graphe 2.1).

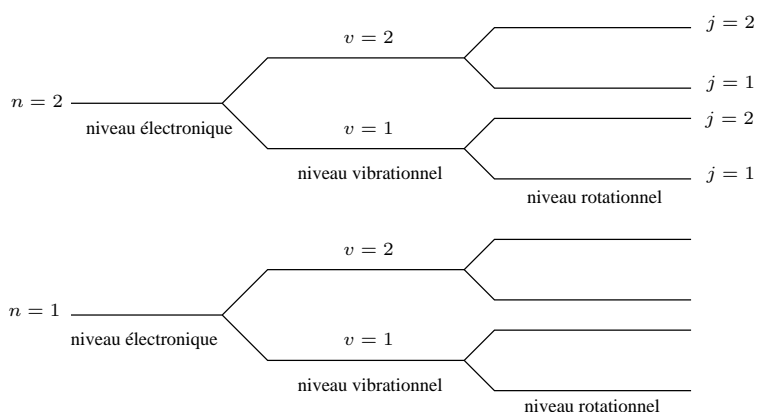


FIGURE 2.1.: Quantification des niveaux d'énergie d'une molécule.

Émission

Supposons une molécule fictive ne possédant que deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 respectivement associés à son état fondamental et excité. Si cette molécule est dans l'état excité, elle retrouve son état fondamental en perdant une énergie $E = E_2 - E_1$. Cette dissipation d'énergie se traduit par l'émission d'un photon d'énergie $E = h\nu_0$ où h est la constante de Planck ($6.626 \cdot 10^{-34} J.s$) et ν_0 la fréquence de l'onde électromagnétique équivalente au quanta d'énergie représenté par ce photon dans une description ondulatoire. On distingue deux types d'émissions (cf. graphe 2.2) :

- L'émission spontanée : La molécule excitée à l'état E_2 retrouve spontanément et sans intervention extérieure son état énergétique fondamental E_1 au bout d'un temps moyen propre à chaque molécule et état d'énergie. Il y a émission d'un photon d'énergie E .
- L'émission induite : Un photon d'énergie $E = h\nu_0$ correspondant à la différence d'énergie des états E_2 et E_1 interagit avec la molécule excitée à l'état E_2 . Cette

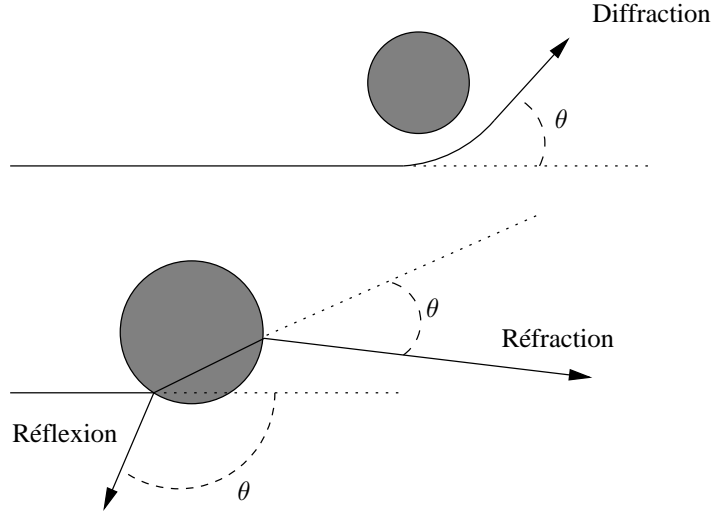


FIGURE 2.3.: Interactions de diffusion de photons par une particule.

Le régime de diffusion dépendant ou indépendant modifie très fortement la modélisation du phénomène de diffusion par la prise en compte des effets de voisinage des particules. La frontière entre ces deux régimes est fonction de la longueur d'onde des photons λ_p , de la taille caractéristique a et de la fraction volumique f_v des particules diffusives. La donnée seule de la vitesse de propagation des photons et de la longueur d'onde permet souvent de définir cette frontière. En effet, nous verrons plus tard que la définition de la vitesse de propagation des photons dans un milieu contient déjà une partie de l'information de diffusion (prise en compte de la réfraction). Le graphe 2.4 décrit le domaine de ces deux régimes en fonction de la fraction volumique et d'une grandeur nommée le paramètre de taille $x_p = \frac{\pi a}{\lambda_p}$. Dans le cadre d'une description mésoscopique du transfert radiatif, l'effet de la diffusion est réduit à la prise en compte de la probabilité d'une interaction de diffusion suivie d'une probabilité de direction de propagation résultante. Ces deux informations sont contenues respectivement dans les deux grandeurs que sont le coefficient de diffusion k_s et la fonction de phase de diffusion Φ . Ces deux grandeurs caractéristiques du milieu de propagation sont définies dans la partie suivante.

2.1.3. Grandeurs caractéristiques du transport

Afin de juger des effets relatifs des différentes interactions rencontrées lors de la propagation des photons, il est nécessaire d'introduire des grandeurs caractéristiques. Ces grandeurs seront ensuite utiles lors de l'écriture de l'équation de transfert radiatif.

Libre parcours moyen de diffusion et coefficient de diffusion

On considère une situation où un flux de photons identiques (même longueur d'onde et même direction de propagation) entre en interaction perpendiculairement à une

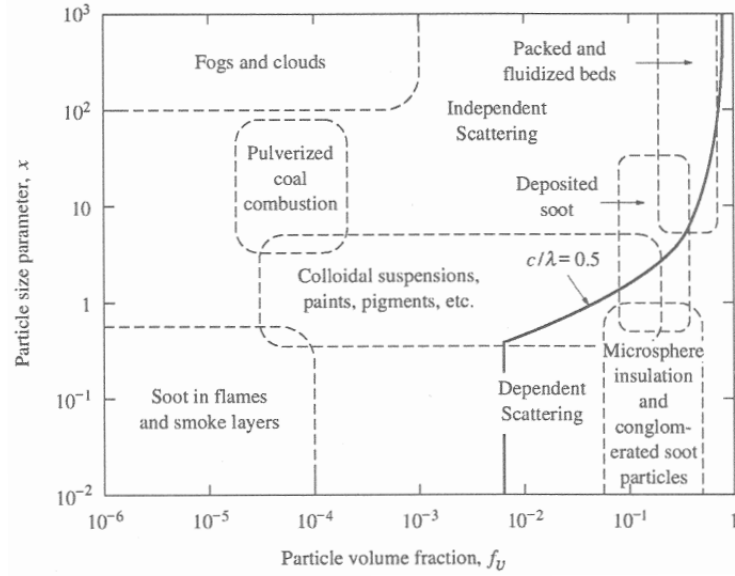


FIGURE 2.4.: Régime de diffusion en fonction du paramètre de taille et de la fraction volumique (tiré de [36]). Ici x représente le paramètre de taille.

couche élémentaire (d'épaisseur dx) composé de particules cibles de densité volumique homogène n_{cible} (cf. graphe 2.5). Le flux incident (entrant dans la couche) est noté ϕ_e . Il n'y a dans la couche qu'une seule interaction possible par photon (afin de caractériser ces interactions, non pour simplifier le problème). Le flux de photons sortants (pour la même direction de propagation) est noté ϕ_s . La proportion de photons (pour cette direction) ayant subi une interaction est simplement $\frac{\phi_e - \phi_s}{\phi_e}$. Il est aisé de comprendre que cette proportion est égale pour une section donnée (S) au produit du nombre de particules cibles par la fraction de section occultée par les particules :

$$\frac{\phi_e - \phi_s}{\phi_e} = n_{cible} dx S \frac{\sigma}{S} \quad (2.1)$$

On en déduit simplement une expression pour la section efficace :

$$\sigma = \frac{\phi_e - \phi_s}{\tilde{n}_{cible} \phi_e} \quad (2.2)$$

où \tilde{n}_{cible} représente la densité surfacique de particules cibles.

A partir de cette grandeur on peut définir, pour un milieu homogène, la distance moyenne que parcourt un photon avant de subir une interaction par diffusion que l'on note l_s et que l'on appelle libre parcours moyen de diffusion :

$$l_s = \frac{1}{\sigma n_{cible}} \quad (2.3)$$

L'inverse du libre parcours moyen de diffusion est le coefficient de diffusion, noté k_s . Ce coefficient est utilisé dans la description mésoscopique du transfert radiatif et

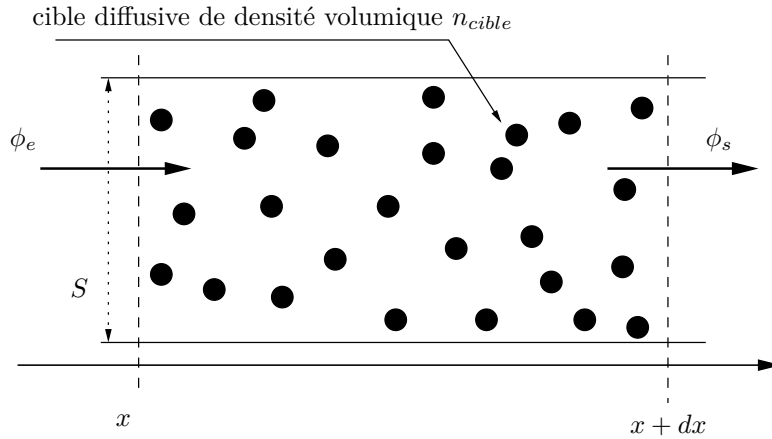


FIGURE 2.5.: Diffusion d'un flux de photon traversant une distribution homogène de particules.

dans l'écriture des équations macroscopiques des photons (cf. 2.2.2). Il est introduit formellement plus bas avec la notion d'atténuation exponentielle dans un milieu des photons par diffusion.

Épaisseur optique de diffusion

A partir du libre parcours moyen de diffusion l_s , il est possible d'isoler deux cas limites de diffusion en fonction de l'épaisseur du milieu étudié. Si l'épaisseur du milieu est faible devant l_s , les photons vont avoir une probabilité faible de subir une diffusion avant de sortir du milieu. On parle dans ce cas d'un milieu optiquement mince en diffusion. A des fins de caractérisation, on peut introduire une grandeur adimensionnelle $\tau_s = \frac{L}{l_s}$ où L est la longueur caractéristique du milieu (épaisseur dans le cas d'un problème mono-dimensionnel). Cette grandeur τ_s est nommée l'épaisseur optique de diffusion. Si elle est inférieure à 1, on considère que le milieu est optiquement mince en diffusion et le régime de diffusion peut être assimilé au régime de diffusion simple : dans ces conditions, les photons n'ont que très peu de chance d'effectuer plusieurs diffusions. La modélisation dans ce cas est fortement simplifiée en considérant qu'ils n'effectuent qu'au plus une diffusion. Du point de vue des particules, elles semblent éclairées par un seul champ incident de photons et on néglige l'éclairement par les particules voisines.

Lorsque l'épaisseur optique de diffusion est nettement supérieure à 1, on parle de milieu optiquement épais et de régime de diffusion multiple. La transition d'un régime de diffusion simple à un régime de diffusion multiple pour une même répartition de centre de diffusion n'est fonction que de l'épaisseur optique du milieu considéré.

Fonction de phase, facteur d'anisotropie et libre parcours moyen de transport

On appelle fonction de phase de diffusion la fonction $\Phi(\mathbf{u}|\mathbf{u}')$ qui représente la densité de probabilité de voir un photon diffusé dans la direction \mathbf{u} sachant que sa direction de propagation avant l'interaction était \mathbf{u}' . En physique, et principalement dans les applications décrites dans ce manuscrit, cette fonction est symétrique autour de \mathbf{u}' de façon à assurer les principes fondamentaux (réciprocité des chemins optiques, second principe, principe de la balance détaillée), et n'est fonction pour nos applications que du produit scalaire entre les deux directions de diffusion $\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}' = \cos\theta$. Néanmoins elle peut présenter des formes tout à fait particulières qui découlent des propriétés d'interactions du champ électromagnétique et de la particule. Il est souvent plus aisé de raisonner avec un nombre réduit de paramètres pour quantifier la fonction de phase, ceci conduit généralement à définir un facteur d'anisotropie (ou facteur d'asymétrie) g à partir de la moyenne des cosinus de l'angle de déviation :

$$g = \int_{-1}^1 \Phi(\cos\theta) \cos\theta d(\cos\theta) \quad (2.4)$$

Ce facteur prend des valeurs comprises entre -1 et 1 et rend compte du caractère asymétrique de la fonction de phase. Ainsi une fonction de phase parfaitement isotrope conduit à une valeur nulle de g . Les valeurs négatives signifient qu'en moyenne les événements de diffusion ont lieu préférentiellement vers l'arrière. Dans les applications de cinétique ce cas est plutôt rare et en général les événements de diffusion se font vers l'avant $g > 0$. A partir de cette grandeur on définit le libre parcours moyen de transport comme suit :

$$l^* = \frac{l_s}{1-g} \quad (2.5)$$

On note que le libre parcours moyen de transport et de diffusion sont égaux dans le cas isotrope.

Le libre parcours moyen de transport s'interprète du point de vue statistique comme un libre parcours moyen équivalent pour lequel on peut considérer que l'on a perdu complètement la mémoire de la direction originale. Pour une fonction de phase isotrope la mémoire de la direction est perdue sur une distance d'un libre parcours moyen alors que pour une fonction de phase orientée fortement vers l'avant, il faudra plusieurs événements de collision pour perdre la trace de la direction originale. Le libre parcours moyen de transport traduit en terme de distance cet effet. Il est souvent utilisé pour l'interprétation et les premières quantifications en remplaçant le problème original (libre parcours moyen plus fonction de phase réelle) en un problème équivalent (libre parcours moyen de transport et isotropie de la fonction de phase).

Libre parcours moyen d'absorption

Tout comme nous avons défini un libre parcours moyen de diffusion, il est possible de définir un libre parcours moyen d'absorption l_a . L'épaisseur optique d'absorption $\tau_a = \frac{L}{l_a}$ permet d'identifier l'opacité d'un milieu. On dit qu'un milieu est opaque (optiquement épais en absorption) si $l_a \ll L$. Un milieu opaque peut aussi être diffusant :

Si l_a est très grand devant l_s , les photons vont pénétrer profondément dans le milieu en étant fortement diffusés avant extinction. Au contraire si $l_a \ll l_s$, la diffusion est négligeable et le milieu se résume à un milieu absorbant. C'est le cas des suspensions opaques comme l'encre de chine.

Pour définir un libre parcours moyen d'absorption, il est nécessaire de pouvoir définir une section efficace d'absorption, ce qui est similaire au cas diffusif si le milieu hôte des particules est inerte (transparent).

Atténuation exponentielle, coefficient d'extinction, albédo

Si l'on cherche simplement à exprimer l'évolution du nombre de photons N se propageant le long d'une direction en subissant des interactions de type absorption avec le milieu, alors l'hypothèse de répartition aléatoire homogène des centres d'interaction conduit à l'expression suivante :

$$\frac{dN}{N} = -\frac{1}{l_a} dl \quad (2.6)$$

En posant N_0 pour le nombre de photons comme condition initiale et en intégrant sur une distance l on a :

$$N = N_0 \exp\left(-\frac{1}{l_a} l\right) \quad (2.7)$$

Cette équation qui traduit une atténuation exponentielle du nombre de photons est connue sous le nom de loi de Beer-Lambert. On note que l'inverse du libre parcours moyen $\frac{1}{l_a} = k_a$ est appelé coefficient d'absorption. De même dans le cas diffusif, on appelle la section efficace de diffusion par unité de volume le coefficient de diffusion k_s . Rappelons que les sections efficaces qu'il y a derrière les libres parcours sont définies sur une population de photons identiques, on parle de coefficients monochromatiques : formellement les coefficients de diffusion et d'absorption sont définis pour chaque fréquence ν . Par ailleurs, ce coefficient peut varier si le milieu est inhomogène, la loi d'atténuation exponentielle (sans diffusion) s'écrivant alors :

$$N = N_0 \exp\left(-\int_0^x k_a(x') dx'\right) \quad (2.8)$$

Finalement, à partir de k_a et k_s est défini un coefficient d'extinction $k = k_a + k_s$ qui caractérise sans différenciation la totalité des effets d'atténuation lors de la propagation des photons. On lui associe le rapport du coefficient de diffusion sur le coefficient d'extinction, nommé albédo de diffusion simple, $\omega = \frac{k_s}{k}$. Cette grandeur, elle aussi dépendante de la fréquence, permet de juger des effets relatifs d'absorption et de diffusion dans un milieu donné.

2.2. Équation de transfert radiatif

L'objectif de ce paragraphe est d'écrire l'équation régissant l'évolution spatio-temporelle des champs radiatifs dans un milieu participant.

2.2.1. Grandeurs descriptives

Avant d'écrire l'équation de transfert, il faut définir quelques grandeurs utiles à la description du transfert radiatif à l'échelle mésoscopique.

A partir de maintenant, dans la suite de ce manuscrit et sauf mention contraire, les grandeurs écrites en gras seront des grandeurs vectorielles contrairement à leurs homologues non graissées qui seront dans la plupart des cas des grandeurs scalaires. Ainsi \mathbf{x} est le vecteur position dans l'espace physique et l'opérateur $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$ est l'opération de dérivation dans l'espace physique ou plus communément, l'opérateur gradient.

Fonction de distribution de photons

En se plaçant à l'échelle mésoscopique pour décrire la propagation des photons, nous devons travailler dans l'espace des phases. Il faut donc employer une grandeur descriptive prenant en compte les trois dimensions spatiales et deux dimensions directionnelles¹. Nous utiliserons le vecteur position $\mathbf{x}(x, y, z)$ pour la dimension spatiale et le vecteur $\mathbf{u}(\theta, \phi)$ concernant la direction de propagation. La fonction $f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est la fonction de distribution. La grandeur $f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{u}$ représente le nombre de photons de fréquence ν , qui à l'instant t , ont une position comprise dans un volume élémentaire $d\mathbf{x}$ centré en \mathbf{x} et une vitesse dans un élément de l'espace des vitesses $d\mathbf{u}$ centré en \mathbf{u} . Cette grandeur est l'équivalent mésoscopique de la notion de densité dans l'espace de description macroscopique mais appliquée ici à l'espace des phases.

Luminance

En rayonnement il est d'usage de définir une autre grandeur que l'on appelle la luminance. La luminance correspond à la puissance par unité de surface normale à la direction \mathbf{u} , par unité d'angle solide et par unité de fréquence, son unité est le $W.m^{-2}.sr^{-1}.Hz^{-1}$. La luminance monochromatique est aisément reliée à la fonction de distribution de photons :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)h\nu c \quad (2.9)$$

où $h\nu$ est l'énergie d'un photon à fréquence ν et c la vitesse de propagation du photon. La vitesse c de la lumière est supposée égale à $\frac{c_0}{n}$ avec c_0 vitesse de la lumière dans le vide et n indice de réfraction du milieu considéré. On inclut donc dans la vitesse de

1. Nous expliciterons plus bas la vitesse de propagation qui s'avère constante dans le milieu, la dimension de l'espace des vitesses est donc réduit à deux. De même les chocs seront ensuite supposés élastiques, la fréquence n'est donc pas prise en compte dans l'espace des phases.

propagation les effets de retard dûs à la diffusion par réfraction dans les particules. Le phénomène de diffusion se limite alors dans cette approche du transport à la diffraction et à la réflexion.

Luminance d'équilibre

Dans le cas particulier du rayonnement thermique, les sources du milieu sont définies à partir de la luminance d'équilibre. La luminance d'équilibre, ou luminance de corps noir est la luminance à l'intérieur d'une cavité isotherme fermée à l'équilibre : En tout point de la cavité, la luminance est isotrope, fonction seulement de la température de la cavité et égale à celle émise par un corps noir² isotherme à même température. Son expression issue de la loi de Planck, est la suivante :

$$L_\nu^0(T) = \frac{2hc^2\nu^3}{\exp(\frac{h\nu}{k_B T}) - 1} \quad (2.10)$$

où $k_B = 1.3806 \cdot 10^{-23} J.K^{-1}$ est la constante de Boltzmann.

Dans les cas que nous traiterons ici, il n'y aura pas de source thermique (milieu "froid") et nous n'aurons donc pas besoin de cette expression mais nous la garderons dans les développements pour conserver un caractère de généralité.

2.2.2. Équation de transfert radiatif

Écriture de l'équation de transfert radiatif sous forme différentielle

Il est maintenant possible d'écrire l'équation d'évolution des photons en milieu aléatoire. C'est une équation de transport corpusculaire s'attachant à décrire la propagation de particules, les photons, d'énergie $h\nu$ en présence des interactions décrites précédemment. Il faut définir en premier lieu certaines hypothèses sous lesquelles s'écrit cette équation :

- Hypothèse de diffusion indépendante : On néglige l'effet distant des centres de diffusion entourant un centre particulier lors de l'évaluation de son interaction de diffusion avec un photon.
- Hypothèse de diffusion élastique : Lors d'un événement de diffusion, le photon conserve sa fréquence ν . Autrement dit, la diffusion n'est pas accompagnée d'un transfert d'énergie du photon vers le centre de diffusion lors d'un choc.
- Hypothèse de l'équilibre thermodynamique local (ETL) : On admet que localement la matière est à un état proche de l'équilibre thermodynamique.

L'évolution de la fonction $L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ à l'échelle mésoscopique est décrite par l'équation de Boltzmann appliquée à des particules spécifiques, les photons. Les hypothèses suivantes sont alors ajoutées :

- Les photons n'interagissent pas entre eux ;
- Les photons se propagent en ligne droite en l'absence d'interaction ;

2. Objet laissant pénétrer tout rayonnement incident à sa surface et l'absorbant intégralement : Il n'y a aucune réflexion ni transmission

- Les photons n’interagissent qu’avec des centres d’interaction (diffusion ou absorption) fixes et distribués aléatoirement dans l’espace.

Cette dernière hypothèse est nommée hypothèse de Lorentz.

L’équation de transport en luminance s’écrit :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = C(L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)) \quad (2.11)$$

Les termes de gauche correspondent au terme de transport pur de la luminance et $C(L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t))$ est le terme d’interaction avec la matière extérieure. Nous allons décomposer ce terme en exprimant chacune de ces interactions. Pour ce faire, on définit r l’abscisse curviligne correspondant à la direction \mathbf{u} .

L’atténuation par absorption s’écrit :

$$\left. \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial r} \right|_{\text{absorption}} = -k_a L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.12)$$

L’équilibre thermodynamique nous permet de déduire le terme source par émission :

$$\left. \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial r} \right|_{\text{émission}} = k_a L_\nu^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.13)$$

L’extinction par diffusion en dehors de la direction de propagation \mathbf{u} étudiée a pour expression :

$$\left. \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial r} \right|_{\text{diffusion sortante}} = -k_s L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.14)$$

L’expression du terme source de diffusion dans la direction \mathbf{u} est moins évident à écrire. En effet, il faut prendre en compte la contribution des photons dans l’ensemble des directions qui au point \mathbf{x} sont diffusés dans la direction \mathbf{u} .

$$\left. \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial r} \right|_{\text{diffusion entrante}} = k_s \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}', t) \Phi(\mathbf{u}|\mathbf{u}') d\Omega(\mathbf{u}') \quad (2.15)$$

Dans cette dernière expression est utilisée la fonction $\Phi(\mathbf{u}|\mathbf{u}')$, fonction de phase de diffusion précédemment introduite. On rappelle qu’elle représente la probabilité qu’un photon incident selon une direction \mathbf{u}' soit diffusé dans la direction \mathbf{u} . Cette fonction dans le cas de diffusion isotrope est très simplement :

$$\Phi_{\text{isotrope}} = \frac{1}{4\pi} \quad (2.16)$$

Son expression est bien moins évidente lorsque l’hypothèse d’isotropie n’est plus valable. Une expression a été développée par Henyey et Greenstein afin d’exprimer la fonction de phase dans le cas d’un nuage de poussière interstellaire [22]. Elle est reliée au coefficient d’anisotropie g défini plus haut par la relation suivante :

$$\Phi_{HG}(\theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^{3/2}} \quad (2.17)$$

Cette fonction de phase est très utilisée lorsqu'on étudie le transfert radiatif dans un milieu aléatoire, permettant de modéliser des phénomènes de diffusion variés [11, 44]. Elle montre cependant ses limites dans les rares cas de densité de probabilités de diffusion très inhomogène [37] (associations de diffusions avant et arrière très fortes).

En sommant toutes ces contributions, on peut écrire une équation de transport des photons, ou en terme de luminance, de l'énergie radiative, sous forme monochromatique :

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = & - (k_a + k_s) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + k_a L_\nu^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \\ & + k_s \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}', t) \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') d\Omega(\mathbf{u}') \end{aligned} \quad (2.18)$$

Dans la plupart des applications, la propagation des photons s'effectuant à la vitesse de la lumière, l'échelle temporelle associée au transport est bien plus petite que celle de tous autres phénomènes. Le transfert radiatif est alors traité comme un problème quasi-stationnaire, le premier terme de l'équation (2.18) est ainsi souvent négligé.

L'équation de transport ainsi obtenue a pour origine l'équation de Boltzmann (non linéaire) écrite pour les gaz sous l'hypothèse de Lorentz (centres d'interactions fixes et distribués aléatoirement) : L'équation de transfert radiatif fait ainsi parti des équations de type Boltzmann-Lorentz ayant la particularité d'un terme de collision conservatif et linéaire.

Forme intégrale de l'ETR

Nous avons écrit directement l'équation de transfert radiatif sous sa forme différentielle. On rencontre aussi cette équation sous sa forme intégrale, écriture parfois plus simple à manipuler lors de formulations particulières de problème de transfert radiatif : Elle est particulièrement utile en vue d'une résolution par une méthode de Monte-Carlo (cf. chapitre 4).

Avant de pouvoir écrire la formulation intégrale on définit la distance optique de transport qui est utile dans l'expression de l'atténuation exponentielle du rayonnement.

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} (k_a + k_s) dr \quad (2.19)$$

où r est l'abscisse curviligne sur le chemin que suit un paquet de photons depuis son origine \mathbf{x}_0 jusqu'au point d'interaction \mathbf{x} considéré. De façon similaire sont définies les distances optiques d'absorption et de diffusion. La distance optique est une grandeur permettant la pondération des effets d'atténuation le long d'un trajet optique indépendamment des directions de propagations.

L'ETR sous forme intégrale s'écrit :

$$\begin{aligned} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = & L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}, t_0) \exp(-\mathcal{T}(\mathbf{x})) \\ & + \int_0^{\mathbf{x}} \exp(-(\mathcal{T}(\mathbf{x}) - \mathcal{T}(\mathbf{x}')))[k_a L_\nu^0(\mathbf{x}', \mathbf{u}, t') \\ & + k_s \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') L_\nu(\mathbf{x}', \mathbf{u}', t') d\mathbf{u}'] d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (2.20)$$

On retrouve les différentes contributions décrites dans la formulation différentielle :

- $L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}, t_0) \exp(-\mathcal{T}(\mathbf{x}))$ est la luminance directe atténuée par diffusion et absorption, le point \mathbf{x}_0 étant défini comme condition à la limite du système (cf. 2.6);
- $\exp(-(\mathcal{T}(\mathbf{x}) - \mathcal{T}(\mathbf{x}'))k_a)L_\nu^0(\mathbf{x}', \mathbf{u}, t')$ représente l'énergie émise en un point \mathbf{x}' dans la direction \mathbf{u} et qui est atténuée entre \mathbf{x} et \mathbf{x}' ;
- $\exp(-(\mathcal{T}(\mathbf{x}) - \mathcal{T}(\mathbf{x}'))k_s) \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}')L_\nu(\mathbf{x}', \mathbf{u}', t')d\mathbf{u}'$ la luminance des photons issus de \mathbf{u}' diffusés en \mathbf{x}' dans la direction \mathbf{u} et qui sont atténués entre \mathbf{x} et \mathbf{x}' .

On notera que le point courant \mathbf{x}' utilisé dans l'écriture intégrale est défini comme une position le long d'un trajet optique (cf graphe 2.6). On constate dans cette écri-

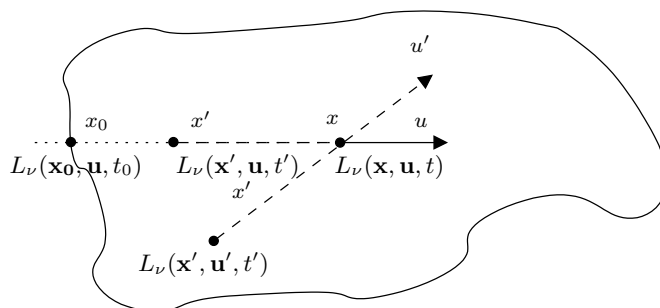


FIGURE 2.6.: Détails des contributions des termes de l'ETR avec notations.

ture que la luminance en un point n'est pas complètement définie : En effet, le terme de diffusion prend en compte la luminance provenant des autres directions. Celle-ci est elle-même définie à l'aide d'autres luminances diffuses respectant (2.20). Le développement complet de cette expression constitue un enchaînement d'intégrales similaires (intégrale de Fredholm). Ce problème existe aussi dans l'écriture différentielle de l'ETR, la définition de la luminance en un point \mathbf{x} et dans une direction \mathbf{u} dépend de la luminance provenant des directions \mathbf{u}' diffusée au point \mathbf{x} dans la direction \mathbf{u} . Ces luminances diffuses ne sont pas non plus définies complètement et une infinité d'équations est formellement nécessaire pour traiter toutes les directions.

Luminance incidente réduite et luminance diffuse

Dans les problématiques de premiers retours, on cherche à analyser les caractéristiques des champs radiatifs au cours de la traversée d'un milieu. Il est souvent utile de séparer dans l'expression de la luminance la contribution liée à la partie qui pénètre dans le milieu et qui ne subit aucun événement de diffusion de la partie de la luminance qui a vécu un ou plusieurs événements de diffusion. Ceci permet de traiter à part les parties très directionnelles et de ne réserver qu'aux parties diffuses des traitements adaptés. On verra en particulier plus loin que ceci prend tout son sens pour l'approximation P1.

- Lorsque l'enveloppe d'un milieu est éclairée depuis l'extérieur, la luminance incidente est atténuée dans le milieu par absorption et diffusion tel que définies

par (2.12) et (2.14). La part de la luminance en un point \mathbf{x} dans la direction \mathbf{u} provenant directement du rayonnement extérieur et n'ayant subi que l'extinction est nommée luminance incidente réduite L_{ri} . Il faut voir que L_{ri} en tout point représente la part du rayonnement qui a pénétré dans le milieu et qui n'a subi aucune interaction avec ce dernier pouvant modifier sa direction de propagation (la part d'atténuation due à la diffusion faisant sortir les photons considérés de la direction \mathbf{u}).

- D'autre part, la luminance en un point \mathbf{x} dans la direction \mathbf{u} provenant des phénomènes ayant lieu au sein du milieu est contenu dans un second terme : la luminance diffuse L_d (cf. graphe 2.7).

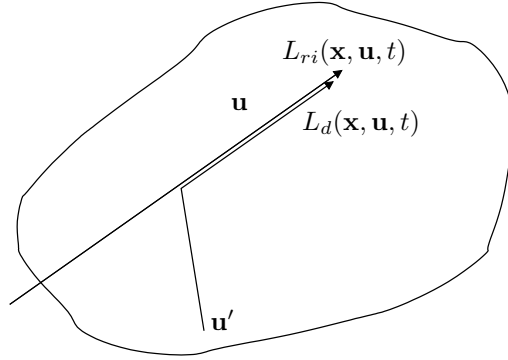


FIGURE 2.7.: Décomposition de la luminance en luminance incidente réduite L_{ri} et luminance diffuse L_d .

L'évolution de la luminance incidente réduite est relativement aisée à écrire : Seule l'atténuation exponentielle du fait de la diffusion et de l'absorption est prise en compte dans ce terme. L_{ri} obéit ainsi à l'équation suivante :

$$\frac{\partial L_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial \mathbf{x}} = -kL_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.21)$$

où k est le coefficient d'extinction défini précédemment. Comme la luminance totale $L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = L_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est solution de l'ETR, on peut déduire l'expression mathématique de l'évolution de la luminance diffuse $L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ à partir de (2.18) et (2.21) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial \mathbf{x}} = & -kL_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + k_s \int_{4\pi} L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}', t) \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') d\Omega(\mathbf{u}') \\ & + k_s \int_{4\pi} L_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}', t) \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') d\Omega(\mathbf{u}') + k_a L^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Dans cette dernière expression, le terme source radiatif interne au milieu (supposé être un corps noir à l'ETL) est inclus dans l'équation de conservation de la luminance diffuse, on prendra pour la suite la notation suivante :

$$\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = k_a L^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.23)$$

Ce choix a été effectué afin que la luminance incidente directe ne prenne en compte que l'éclairement extérieur du milieu.

Il apparaît un second terme source dans (2.22) représentant la luminance provenant de l'extérieur et ayant été redistribuée par diffusion :

$$\epsilon_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = k_s \int_{4\pi} L_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}', t) \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') d\Omega(\mathbf{u}') \quad (2.24)$$

Par définition, la luminance diffuse n'est ainsi générée qu'à l'intérieur du milieu. Une condition limite aux parois est donc nécessaire pour compléter son expression : À la paroi, il ne peut y avoir de luminance diffuse entrante dans le domaine. Ceci se traduit par la condition suivante à la paroi :

$$L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)|_{\partial\Omega} = H(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.25)$$

où H est la fonction Heaviside et \mathbf{n} la normale sortante.

La séparation de la luminance totale en deux parties permet de faciliter les analyses lors de la modélisation de situations aux cas limites des faibles ou fortes épaisseurs optiques de diffusion. Ces cas limites font l'objet d'une présentation dans 2.3.

2.2.3. Marche aléatoire en biologie

L'ensemble du contexte théorique que nous venons de décrire est présenté dans le cadre du transfert radiatif mais, comme nous l'avons déjà explicité, il est possible de trouver une lecture plus large dans le cadre de la théorie du transport linéaire. Nous pouvons mentionner en particulier le travail effectué au sein de l'équipe en liaison avec des biologistes pour l'étude des phénomènes d'auto-organisation dans les sociétés animales et plus particulièrement les sociétés d'insectes.

Il s'agit par exemple de comprendre comment une colonie de fourmis ou termites arrive à s'organiser pour effectuer des tâches d'apparence harmonieuse qui conduisent à la construction d'édifices architecturaux d'une grande complexité (nids par exemple). Dans certaines théories descriptives de ce type de comportement, l'individu est supposé agir de façon aléatoire avec une statistique bien déterminée. Par exemple le déplacement est caractérisé comme une marche aléatoire de Pearson qui correspond strictement à la statistique énoncé pour les photons, à savoir un déplacement composé d'une succession de libre parcours de distribution exponentielle et un changement de direction auquel est associé une fonction de phase. Des termes sources et puits existent de la même façon lorsqu'on distingue différentes sous-populations d'individus.

Il résulte en général de ces descriptions une formulation sous forme d'une ou plusieurs équations de transport couplées tout à fait similaires à l'équation de transfert radiatif. Le présent travail s'appuie d'avantage sur les applications radiatives mais il faut noter que tous les résultats théoriques que nous présenterons par la suite seront intégralement applicables aux situations de biologie décrites ci dessus. En particulier l'origine du travail sur les distributions de chemins provient d'une situation d'analyse expérimentale en biologie du comportement (cf. chapitre 3).

2.3. Solutions approchées de l'ETR

L'équation de transfert radiatif peut présenter des difficultés importantes pour sa résolution. En effet, la conservation de l'information directionnelle par rapport à la description macroscopique entraîne une lourdeur des écritures dès que le phénomène de diffusion est pris en compte.

Nous allons présenter dans cette partie les approximations utilisées dans les cas limites des épaisseurs optiques de diffusions faibles et fortes, là où des hypothèses peuvent être formulées afin de simplifier l'ETR et obtenir des solutions analytiques.

2.3.1. Faible épaisseur optique de diffusion

Dans le cas où l'épaisseur optique de diffusion est petite, on peut considérer que les photons subissent au maximum une seule diffusion. Dans ce cas la luminance en un point et dans une direction peut toujours simplement s'expliquer à partir du rayonnement provenant des parois ou des sources. Ainsi, la composante diffuse est approximée en ne considérant que les contributions provenant d'une seule diffusion depuis l'émission. Ce raisonnement permet de proposer une écriture appelée solution au premier ordre (*first order solution*) qui supprime donc le problème de l'expression complète du terme diffusion multiple dans l'ETR.

On considère un volume Ω de frontière $\partial\Omega$ rempli d'un milieu à l'équilibre, diffusant et absorbant, caractérisé par ses coefficients de diffusion k_s et d'absorption k_a (cf. graphe 2.8). En toute généralité, ces coefficients n'étant pas constants, on utilise la distance optique $\mathcal{T}(\mathbf{x})$ le long d'une trajectoire. Afin de simplifier les écritures, seul le bilan de la luminance monochromatique³ en un point \mathbf{x} du volume et dans une direction \mathbf{u} est effectué. Nous utilisons les notations introduites dans 2.2.2 mais effectuons un bilan avec la forme intégrale :

- Aucune hypothèse n'est faite sur la partie incidente réduite de la luminance : Le rayonnement issu de la frontière (ou émis à l'extérieur et transmis par celle-ci) dans la direction \mathbf{u} va atteindre le point \mathbf{x} en ayant subi une atténuation par absorption et diffusion. Cette contribution a pour expression :

$$L_{ri} = L_i(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}) \exp(-\mathcal{T}(\mathbf{x})) \quad (2.26)$$

où \mathbf{x}_0 est le point appartenant à la frontière $\partial\Omega$ vu depuis \mathbf{x} dans la direction $-\mathbf{u}$ et $L_i(\mathbf{x}_0, \mathbf{u})$ la luminance caractérisant l'énergie émise (ou transmise) par ce point.

- La partie diffuse de la luminance est décrite par l'hypothèse de diffusion simple : Comme les contributions des chemins optiques sont négligées lorsque plus d'un événement de diffusion a eu lieu, alors le terme décrivant le phénomène de redistribution directionnelle de la luminance interne au milieu disparaît et seul le source ϵ_{ri} est pris en compte. L'expression de la partie diffuse de la luminance est

3. Nous supprimons l'indice ν pour alléger l'écriture.

donc :

$$L_d = \int_0^x k_a L_0(\mathbf{x}', \mathbf{u}) \exp\left(-(\mathcal{T}(\mathbf{x}) - \mathcal{T}(\mathbf{x}'))\right) dx' + \int_0^x \exp\left(-(\mathcal{T}(\mathbf{x}) - \mathcal{T}(\mathbf{x}'))\right) k_s \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') L_i(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}') \exp(-\mathcal{T}(\mathbf{x}')) d\mathbf{u}' d\mathbf{x}' \quad (2.27)$$

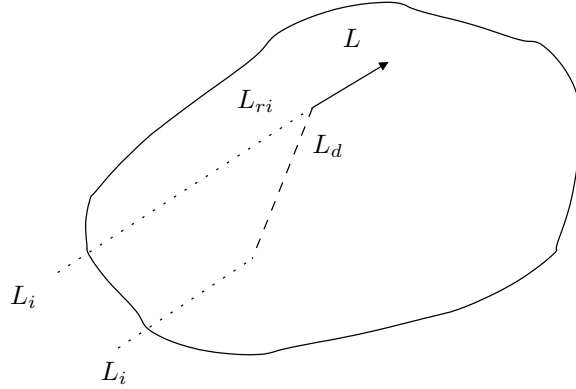


FIGURE 2.8.: Solution de diffusion au premier ordre dans le cas d'épaisseur optique faible.

En sommant ces contributions, on obtient l'expression de la luminance monochromatique :

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = L_i(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}) \exp(-\mathcal{T}(\mathbf{x})) + \int_0^x \exp\left(-(\mathcal{T}(\mathbf{x}) - \mathcal{T}(\mathbf{x}'))\right) \left[k_a L_0(\mathbf{x}', \mathbf{u}) + k_s \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') L_i(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}') \exp(-\mathcal{T}(\mathbf{x}')) d\mathbf{u}' \right] d\mathbf{x}' \quad (2.28)$$

Cette expression, contrairement à (2.20) est totalement définie, pourvu que les conditions aux limites $\partial\Omega$ soient définies, c'est à dire que l'émission des sources extérieures soit connue.

2.3.2. Forte épaisseur optique de diffusion

Le cadre théorique présenté ici s'appuie essentiellement sur les présentations [17] et [23]. Dans le cas des fortes épaisseurs optiques, il est souvent possible d'intégrer l'équation de transfert radiatif sur la partie angulaire pour obtenir une description macroscopique du phénomène. En effet la luminance tend à devenir isotrope du fait des diffusions multiples et il est alors possible de formuler des hypothèses tout à fait raisonnables sur un profil perturbé autour de l'isotropie. Les difficultés de modélisation liées à la description mésoscopique, à savoir la conservation de l'information

directionnelle, peuvent être contournées dans ces conditions. Nous illustrons dans une première partie le passage possible d'une description mésoscopique à une description macroscopique et les hypothèses afférentes. Dans une seconde partie, nous retranscrivons ces hypothèses sur la formulation introduite dans 2.2.2 afin d'explicitier plus précisément les conditions aux limites d'un problème de transfert radiatif exprimé par une approche macroscopique. Ces expressions détaillées seront mises à contribution au chapitre 5.

Passage du mésoscopique au macroscopique

Grandeurs de passage du mésoscopique au macroscopique Le passage d'une formulation mésoscopique à une formulation macroscopique impose d'introduire de nouvelles notations s'affranchissant de la dépendance directionnelle :

Densité de photons

$$n = \int_{4\pi} f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u} \quad (2.29)$$

n représente le nombre de photons par unité de volume. C'est l'expression de la densité macroscopique usuelle dans l'espace géométrique.

Vitesse moyenne

$$\mathbf{V} = \frac{1}{n} \int_{4\pi} c\mathbf{u} f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u} \quad (2.30)$$

\mathbf{V} est la vitesse utilisée habituellement dans la description macroscopique, on l'appelle aussi vitesse d'ensemble.

Vecteur densité de flux de photons

$$\mathbf{j} = n\mathbf{V} \quad (2.31)$$

\mathbf{j} représente le vecteur flux radiatif.

Mise en équation macroscopique Dans tous les cas de figure, le point de départ est l'équation de transfert radiatif sous sa forme différentielle et en régime instationnaire. L'indice ν est une fois de plus omis et les dépendances des variables à \mathbf{x} , \mathbf{u} et t ne sont pas non plus mentionnées. Écrite en terme de fonction de distribution l'ETR a pour expression :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c\mathbf{u} \cdot \vec{\text{grad}}(f) = -k_a c(f - f^0) - k_s c \int_{4\pi} (f - f') \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') d\Omega(\mathbf{u}') \quad (2.32)$$

où f^0 est la distribution d'équilibre des photons à température locale.

On commence par intégrer l'ETR sur la sphère unité afin de faire apparaître les grandeurs macroscopiques vitesse moyenne et densité de photons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n\mathbf{V}) = -k_a c(n - n^0) \quad (2.33)$$

où $n^0 = 4\pi f^0$ est la densité d'équilibre à la température locale. On notera la disparition à l'échelle macroscopique des termes de diffusion à l'échelle mésoscopique : En effet, la diffusion ne fait que redistribuer les photons localement sur les directions mais une fois intégré il n'y a aucun effet de source. Nous avons par ailleurs utilisé la propriété suivante :

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} \mathbf{u} \cdot \vec{\text{grad}}(f) d\Omega(\mathbf{u}) &= \int_{4\pi} \text{div}(f\mathbf{u}) d\Omega(\mathbf{u}) - \int_{4\pi} f \text{div}(\mathbf{u}) d\Omega(\mathbf{u}) \\ &= \int_{4\pi} \text{div}(f\mathbf{u}) d\Omega(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (2.34)$$

$\text{div}(\mathbf{u})$ est nul car les variables \mathbf{x} et \mathbf{u} sont indépendantes.

A ce stade, aucune approximation n'a encore été faite pour établir l'équation (2.33).

De la même façon, on multiplie l'ETR par la vitesse particulière $c\mathbf{u}$ et on intègre l'équation résultante sur la sphère unité afin d'obtenir une seconde équation mettant en jeu la densité de photon et la vitesse d'ensemble :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n\mathbf{V}}{\partial t} + \int_{4\pi} [c\mathbf{u} \cdot \vec{\text{grad}}(f)] c\mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}) &= -k_a cn\mathbf{V} - k_s cn\mathbf{V} \\ &+ \int_{4\pi} k_s c^2 f' \left[\int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') \mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}') \right] d\Omega(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

En utilisant la symétrie des fonctions de phase radiatives et l'hypothèse qu'elles ne sont fonctions que du produit scalaire $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'$, il est possible d'écrire :

$$\int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') \mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}') = g\mathbf{u}' \quad (2.36)$$

On simplifie alors (2.35) :

$$\frac{\partial n\mathbf{V}}{\partial t} + \int_{4\pi} [c\mathbf{u} \cdot \vec{\text{grad}}(f)] c\mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}) = -[k_a + (1-g)k_s] cn\mathbf{V} \quad (2.37)$$

Les équations (2.33) et (2.37) forment un système de description macroscopique des grandeurs n et \mathbf{V} non fermé. En effet, la grandeur f est encore présente dans un terme de (2.37). Des hypothèses supplémentaires⁴ sont nécessaires afin de traiter la partie intégrale issue de la description mésoscopique.

Approximation P1 Une hypothèse sur la distribution des photons à forte épaisseur optique de diffusion permet de faire disparaître f de l'équation (2.37) : Du fait du grand nombre d'événements de diffusion, on suppose que la distribution $f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est proche de l'isotropie. On peut alors représenter f de façon approchée par les deux premiers termes de sa décomposition en harmoniques sphériques (approximation P1⁵) :

$$f \approx \frac{n}{4\pi} + \frac{3}{4\pi c} n\mathbf{V} \cdot \mathbf{u} \quad (2.38)$$

4. La seule faite à ce stade est une forme particulière des fonctions de phase.

5. D'autres types d'hypothèses et de méthodes peuvent aussi être utilisés comme la méthode des moments.

Cette hypothèse suppose qu'au cours de leur propagation, les photons subissent un nombre moyen d'interactions de diffusion élevé.

Sous l'approximation P1, on obtient alors le système suivant à partir de (2.33) et (2.37) :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{j}) = -k_a c(n - n^0) \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \frac{c^2}{3} \text{grad}(n) \approx -[k_a + (1 - g)k_s]c\mathbf{j} \quad (2.40)$$

Approximation de diffusion Le système d'équation précédent peut souvent être réécrit en négligeant les variations temporelles du flux \mathbf{j} devant les autres termes de la seconde équation (cf. remarque suivante). On obtient le système d'équation sur le flux radiatif suivant :

$$\frac{\partial n}{\partial t} \approx \text{div}(D\vec{\text{grad}}(n)) - k_a c(n - n^0) \quad (2.41)$$

$$\mathbf{j} = -D\vec{\text{grad}}(n) \quad (2.42)$$

où l'on retrouve le modèle usuel de diffusion macroscopique avec la définition du coefficient de diffusion macroscopique D :

$$D = \frac{c}{3[k_a + (1 - g)k_s]} \quad (2.43)$$

On note qu'il n'y a pas de différence entre l'approximation de diffusion et l'approximation P1 en régime stationnaire.

L'écriture (2.41) est particulièrement utile : Ce type d'équation présente des facilités de résolution sans commune mesure vis à vis de l'ETR sous sa forme générale.

Condition de validité de l'approximation de diffusion Afin d'étudier les conditions de validité de l'approximation de diffusion, on considère un système purement diffusif ($k_a = 0$) et une situation mono-dimensionnelle. Le système (2.39) s'écrit alors :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0 \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial j_x}{\partial t} + \frac{c^2}{3} \frac{\partial n}{\partial x} = -[(1 - g)k_s]c j_x \quad (2.45)$$

Soit \tilde{n} et \tilde{j}_x les transformées de Fourier de n et j_x , avec $n = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{n} \exp(i\zeta x) d\zeta$ et $j_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{j}_x \exp(i\zeta x) d\zeta$. La transformée de Fourier du système précédent est :

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = -i\zeta \tilde{j}_x \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial \tilde{j}_x}{\partial t} = -i\zeta \frac{c^2}{3} \tilde{n} - [(1 - g)k_s]c \tilde{j}_x \quad (2.47)$$

Il en vient alors :

$$\frac{1}{(1-g)k_s c^2} \frac{\partial^2 \tilde{n}}{\partial t^2} + \frac{1}{c} \frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} + \frac{\zeta^2}{3(1-g)k_s} \tilde{n} = 0 \quad (2.48)$$

La résolution de ce système permet de faire apparaître deux temps caractéristiques :

$$\tau_+ = \frac{1}{\frac{k^* c}{2} \left(-1 + \sqrt{1 - \frac{4\zeta^2}{3k^{*2}}} \right)} \quad (2.49)$$

$$\tau_- = \frac{1}{\frac{k^* c}{2} \left(-1 - \sqrt{1 - \frac{4\zeta^2}{3k^{*2}}} \right)} \quad (2.50)$$

où $k^* = \frac{1}{l^*} = (1-g)k_s$ est l'inverse du libre parcours moyen de transport introduit au début de ce chapitre.

Lorsque les extensions caractéristiques du système sont grandes devant le libre parcours moyen de transport ($\frac{\zeta}{k^*} \ll 1$), on peut écrire :

$$\tau_+ = \frac{3k^*}{\zeta^2 c} \quad (2.51)$$

$$\tau_- = \frac{1}{k^* c} \quad (2.52)$$

avec $\tau_+ \gg \tau_-$. Le premier temps correspond au temps caractéristique d'atténuation par diffusion d'une perturbation d'extension $1/\zeta$. Le second correspond au temps nécessaire pour parcourir un libre parcours moyen de transport à la vitesse c . Si l'approximation de diffusion est appliquée, alors le terme $\frac{\partial j_x}{\partial t}$ disparaît de (2.44) et le seul temps caractéristique du système obtenu par la démarche exposée est $\tau = \frac{3k^*}{\zeta^2 c}$, qui correspond au temps d'atténuation par diffusion : Les dynamiques temporelles associées au temps caractéristique τ_- sont négligées. L'hypothèse de diffusion sera donc valable si les temps d'observation sont grands devant τ_- .

Forte épaisseur optique de diffusion - Formulation en incidence réduite

La partie précédente a permis de réécrire l'équation macroscopique de diffusion à partir de l'ETR. Dans la partie qui va suivre, cette transformation va être reprise mais en effectuant le travail sur l'écriture de l'ETR par décomposition de la luminance en deux contributions tel que présenté dans 2.2.2. Ce travail est effectué afin de pouvoir exprimer plus facilement les conséquences de l'approximation P1 dans le cadre de l'écriture des conditions aux limites du problème de diffusion macroscopique. Ces conditions aux limites seront d'une grande importance au cours du chapitre 5.

Grandeurs utiles Nous allons dans ce paragraphe conserver les notations utilisées par [23], l'écriture de départ sera de luminance plutôt qu'en fonction de distribution et les grandeurs macroscopiques résultantes seront associées à des énergies plutôt qu'à des densités. Le passage de l'une à l'autre ne se fait que par un jeu de constante. On introduit les deux grandeurs suivantes :

La luminance moyenne

$$U(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{u} = \frac{n}{4\pi} h\nu c \quad (2.53)$$

Le vecteur densité de flux

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) = \int_{4\pi} \mathbf{u} L_\nu(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{u} = h\nu \mathbf{j} \quad (2.54)$$

Hypothèses à forte épaisseur optique de diffusion

Luminance incidente La luminance incidente est réduite de la même façon que dans le problème général. Son expression simple ne nécessite aucune hypothèse dans le cas des fortes épaisseurs optiques de diffusion.

Luminance diffuse Lors de l'écriture de l'approximation de diffusion, nous avons fait l'hypothèse P1 : La distribution des photons à forte épaisseur optique de diffusion est toujours proche de l'équilibre. Lorsque l'on décompose la luminance en une partie incidente et une partie diffuse, cette hypothèse ne concerne que la partie diffuse qui subit les diffusions : On considère que la luminance diffuse au sein du milieu est proche de l'équilibre mais qu'il existe tout de même un flux de diffusion non nul. L'approximation P1 en terme de luminance devient ⁶ :

$$L_d(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) = U_d(\mathbf{x}) + \frac{3}{4\pi} \mathbf{F}_d(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{u} \quad (2.55)$$

Mise en équation macroscopique Nous écrirons l'ensemble du problème en stationnaire car comme nous l'avons vu précédemment aucune difficulté dans la prise de moyenne ne provient du terme en dérivée temporelle. Les dépendances aux variables ne seront plus mentionnées afin d'alléger les écritures. L'intégration sur la sphère unité de (2.22) donne l'expression :

$$\operatorname{div} \mathbf{F}_d(\mathbf{x}) = -4\pi k_a U_d(\mathbf{x}) + 4\pi k_s U_{ri} + E(\mathbf{x}) \quad (2.56)$$

où $E(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} \epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) d\Omega(\mathbf{u})$.

6. On peut utiliser la relation (2.38) et les grandeurs définies plus haut pour retrouver cette relation.

On peut aussi considérer que $L_d = a(\mathbf{x}) + \mathbf{b}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}$ où $a(\mathbf{x})$ est un scalaire représentant la valeur d'équilibre et $\mathbf{b}(\mathbf{x})$ la déviation. On utilise ensuite les définitions de U_d et \mathbf{F}_d pour calculer $a(\mathbf{x})$ et $\mathbf{b}(\mathbf{x})$:

$$U_d(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} L_d(\mathbf{u}, \mathbf{x}) d\mathbf{u} = a(\mathbf{x})$$

et

$$\mathbf{F}_d(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} L_d(\mathbf{u}, \mathbf{x}) \mathbf{u} d\mathbf{u} = U_d \int_{4\pi} \mathbf{u} d\mathbf{u} + \mathbf{b}(\mathbf{x}) \cdot \int_{4\pi} \mathbf{u} \mathbf{u} d\mathbf{u} = \frac{4\pi}{3} \mathbf{b}(\mathbf{x})$$

En notant que le vecteur \mathbf{u} dans les coordonnées sphériques est défini par $[\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta]$.

En utilisant (2.55) dans (2.22) :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \vec{\text{grad}}(U_d) + \frac{3}{4\pi} \mathbf{u} \cdot \vec{\text{grad}}(\mathbf{F}_d \cdot \mathbf{u}) = \\ -kU_d - \frac{3}{4\pi} k \mathbf{F}_d \cdot \mathbf{u} + k_s U_d + \frac{3}{4\pi} \mathbf{F}_d \cdot \mathbf{u} g + \epsilon_{ri} + \epsilon \end{aligned} \quad (2.57)$$

où nous supposons encore une fois que la fonction de phase $\Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}')$ n'est fonction que du produit scalaire $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'$ et retrouvons g

$$g = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{u}') \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}' d\Omega(\mathbf{u}') \quad (2.58)$$

Nous multiplions enfin (2.57) par \mathbf{u} et intégrons sur toutes les directions :

$$\begin{aligned} \vec{\text{grad}}U_d = -\frac{3}{4\pi} k(1-g) \mathbf{F}_d + \\ \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \epsilon_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}) + \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (2.59)$$

Les équations (2.57) et (2.59) peuvent être combinées pour donner l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \Delta U_d(\mathbf{x}) - \kappa^2 U_d(\mathbf{x}) = -3k_s k(1-g) U_{ri}(\mathbf{x}) - \frac{3}{4\pi} k(1-g) E(\mathbf{x}) + \\ \frac{3}{4\pi} \nabla \cdot \int_{4\pi} \epsilon_{ri}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}) + \frac{3}{4\pi} \nabla \cdot \int_{4\pi} \epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (2.60)$$

où $\kappa^2 = 3k_a k(1-g)$.

Cette équation représente l'expression complète de l'approximation de diffusion stationnaire⁷. Pour que le problème soit posé correctement il est nécessaire de traduire la condition à la limite sur la luminance diffuse (2.25).

Conditions aux limites A la frontière du domaine, la luminance diffuse entrante doit être nulle. Cependant, du fait du passage aux grandeurs macroscopiques et donc de la perte de l'information directionnelle, on ne peut satisfaire à la fois (2.25) et (2.55). Il faut donc aussi effectuer une approximation sur l'écriture de la condition à la frontière. L'une d'elles est d'imposer un flux total entrant nul :

$$\int_{2\pi} L_d(\mathbf{x}, \mathbf{u}) (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) d\Omega(\mathbf{u}) = 0 \quad (2.61)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal entrant à la surface, l'intégration étant effectuée sur l'ensemble des directions définies dans l'hémisphère interne au milieu (tel que $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} > 0$). Cette dernière condition peut s'expliciter sur U_d ([23, chap. 9]). Pour ce faire il faut

7. Lorsque l'évolution par rapport au temps doit être prise en compte, l'équation prend la forme $D\Delta u - au = \partial u / \partial t$ où D est le coefficient de diffusion macroscopique et a représente l'absorption.

d'abord décomposer le flux \mathbf{F}_d aux limites du domaine en une composante normale F_{dn} et tangentielle F_{dt} :

$$\mathbf{F}_d = F_{dn}\mathbf{n} + F_{dt}\mathbf{t} \quad (2.62)$$

En utilisant la relation précédente, (2.55) et la condition de flux nul, on obtient le système suivant après intégration dans les coordonnées du système sphérique défini sur \mathbf{n} et \mathbf{t} :

$$\int_{2\pi} (F_{dt}\mathbf{t}\cdot\mathbf{x})(\mathbf{x}\cdot\mathbf{n})d\Omega(\mathbf{u}) = F_{dt} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \sin\theta \cos\phi \cos\theta \sin\theta d\theta d\phi = 0 \quad (2.63)$$

$$\int_{2\pi} (F_{dn}\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})(\mathbf{x}\cdot\mathbf{n})d\Omega(\mathbf{u}) = F_{dn} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos^2\theta \sin\theta d\phi d\theta = \frac{2\pi}{3}F_{dn} \quad (2.64)$$

Et la condition limite quand \mathbf{x} est à la paroi devient :

$$\frac{1}{2}U_d(\mathbf{x}) + \frac{F_{dn}(\mathbf{x})}{4\pi} = 0 \quad (2.65)$$

On exprime ensuite F_{dn} grâce à (2.59) :

$$F_{dn} = \mathbf{n}\cdot\mathbf{F}_d = -\frac{4\pi}{3k(1-g)}\mathbf{n}\cdot\vec{\text{grad}}U_d(\mathbf{x}) + \mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_1(\mathbf{x}) \quad (2.66)$$

avec

$$\mathbf{Q}_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{k(1-g)} \int_{4\pi} [\epsilon_{ri}(\mathbf{x}\cdot\mathbf{u}) + \epsilon(\mathbf{x}\cdot\mathbf{u})] d\Omega(\mathbf{u}) \quad (2.67)$$

en l'absence de source et pour une diffusion isotrope $\mathbf{Q}_1 = 0$. On obtient enfin comme condition à la paroi sur U_d :

$$U_d(\mathbf{x}) - \frac{2}{3k(1-g)} \frac{\partial}{\partial n} U_d(\mathbf{x}) + \frac{2\mathbf{n}\cdot\mathbf{Q}_1(\mathbf{x})}{4\pi} = 0 \quad (2.68)$$

Il est important de garder en mémoire que cette condition n'est qu'une approximation. L'approximation de diffusion elle-même n'est valable que loin des parois et des sources. Cette condition à la limite est la traduction de la condition exacte à la paroi pour une formulation approximée du problème. A ce titre, cette condition initiale a été confrontée dans un cas particulier où le problème de diffusion admet une solution exacte. Ce cas précis traite de la diffusion dans une couche semi-infinie par des diffuseurs isotropes et est connu sous l'appellation du problème de Milne. Nous n'étudierons pas la résolution de ce problème ici et le lecteur intéressé pourra se référer à l'importante documentation disponible à ce sujet du fait de l'intérêt théorique et historique de ce résultat. Nous citerons entre autres [49, p. 16] et [12]. Dans le problème de Milne, la solution exacte du problème peut être divisée en deux contributions dont l'une d'entre elles est solution de l'approximation de diffusion ayant pour condition à la frontière :

$$U_d(\mathbf{x}) - \frac{0.7104}{k(1-g)\omega} \frac{\partial}{\partial n} U_d(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.69)$$

où $\omega = k_s/k$ est l'albédo de diffusion. Le domaine de validité de la solution sous cette condition est défini pour des albédos compris entre 0.6 et 1. On peut comparer les expressions (2.68) et (2.69) des conditions aux limites et remarquer que la valeur $\frac{2}{3k(1-g)}$ est remplacé par $\frac{0.7104}{k(1-g)\omega}$. Il est ainsi clair que la valeur 2/3 de (2.68) dans l'expression de la condition de bord n'est qu'une valeur approximative. Le rapport $\chi = \frac{0.7104}{2/3}$ est utilisé dans le chapitre 5 lorsque les conditions de bord de l'équation de diffusion sont étudiées.

Le problème posé par la modélisation du flux de diffusion à la paroi sous l'approximation de diffusion a abouti à d'autres types de conditions non présentés ici car n'ayant pas été utilisés dans nos travaux. On peut à ce titre citer les travaux de Deissler dans lesquels l'approximation de diffusion est utilisée avec conservation du flux à la paroi mais un saut de température (dans le cas de transfert de chaleur) est introduit [15].

2.4. Modélisation des problèmes de premiers retours

2.4.1. Caractéristiques de modélisation des premiers retours

Comme nous l'avons déjà mentionné, les problèmes de premier retour s'intéressent à caractériser les champs radiatifs sortants du milieu à partir de la connaissance des champs incidents sur le milieu et des propriétés de ce dernier. D'un point de vue théorique, et dans le cadre limite qu'est le notre, le problème est parfaitement bien posé à partir de l'équation de transfert radiatif et de la connaissance des champs de luminances incidents sur la frontière. Il est donc possible de résoudre le problème complètement pour obtenir les champs de luminances sur la frontière correspondants aux photons qui quittent le milieu. En général pour des géométries complexes, il faut utiliser des méthodes numériques, les solutions analytiques étant très rares. Dans notre travail ces solutions de référence seront obtenues par la méthode de Monte-Carlo que nous détaillerons dans un prochain chapitre. Il faut bien noter que toute la difficulté du problème provient du fait que nous traitons des milieux multi-diffusants.

Les applications auxquelles nous pensons (tomographie optique appliquée au biomédical) nécessitent de mettre en place une méthodologie d'inversion pour remonter aux propriétés du milieu. Les procédures d'inversion doivent être suffisamment robustes et rapides pour à terme rendre les méthodes effectives. Il est donc nécessaire de simplifier la modélisation du problème direct de façon à éviter d'avoir à résoudre un grand nombre de fois l'équation de transfert radiatif dans sa forme complète. A l'exception de quelques travaux effectués dans le milieu informatique (Thèse en cours Olivier Gourmel IRT) qui utilisent les ressources parallèles des cartes graphiques pour essayer de résoudre le problème sans simplification, il n'est envisagé pratiquement que des solutions utilisant l'approximation de diffusion.

Pour les problèmes de premiers passage dans lequel la source est à l'intérieur du domaine, l'approximation de diffusion permet de traiter avec succès de nombreux cas. Même dans ces cas, il est déjà mentionné des difficultés dès lors que la source est proche de la frontière du domaine. En effet les statistiques sous-jacentes à l'approxi-

mation de diffusion deviennent incorrectes si l'on n'est pas en mesure d'observer ce qui se produit après plusieurs évènements collisionnels. Or dès que l'on est près des bords, cette condition n'est plus vérifiée. De ce point de vue le cas que nous essayons de traiter dans les problèmes de premier retour est extrême puisque la source du rayonnement est directement sur la frontière par l'intermédiaire des conditions aux limites. Il faut ajouter à cela qu'une des difficultés de l'approximation de diffusion est que les conditions aux limites, quelque soit le niveau de pertinence de l'approximation dans le champs, ne peuvent rendre compte exactement des distributions sous-jacentes puisqu'elles sont exprimées en densité et flux net.

Une des grandeurs importantes pour la caractérisation des problèmes de premier retour concerne la distribution des longueurs des chemins de photons dans le milieu entre l'entrée du système et la sortie. Toute information sur la distribution des longueurs peut être reliée à la distribution des temps de séjours dans le cas d'une vitesse uniforme et constante. La distribution des longueurs de chemins dans le cas d'un problème de premier retour est directement reliée aux densités de flux en tout point de la surface. En effet il est aisé de voir que la densité de flux en un point nous donne directement l'information sur la quantité de photons qui traversent par unité de temps un élément de frontière et ceci à chaque instant. Or les photons qui traversent la frontière à un instant donné ont exactement parcouru une distance $l = c t$, ce qui permet en connaissant la densité de flux à tous les instants de remonter à la distribution.

Une fois que l'on a posé la problématique en terme de distribution des longueurs, les questions qui émergent sont reliées à la caractérisation des chemins dits courts. Un chemin court est un chemin pour lequel il y a peu d'évènements de diffusion. Ces chemins n'obéissent en général à aucune statistique simple et il est difficile d'en rendre compte par des modèles simplifiés. Ceci est la traduction en terme de statistique de chemins, des difficultés que nous avons énoncés précédemment sur l'approximation de diffusion près des frontières.

2.4.2. Des solutions disponibles

Dans la suite de ce manuscrit, l'usage de l'approximation de diffusion sera faite pour calculer la distribution des longueurs des chemins de premier passage. Des cas académiques seront utilisés en premier lieu afin de profiter de simplifications physiques du problème aboutissant à des solutions analytiques. De fait, nous présentons ici les cas dans lesquels l'équation de diffusion a une solution analytique : La diffusion mono-dimensionnelle le long d'une ligne ou dans une couche mono-dimensionnelle infinie, pour une distribution de départ des particules uniformément constante ou sous forme d'un Dirac. Pour les conditions aux limites, on fixe à zéro la variable dont on suit l'évolution (ici la densité ρ des particules). Les solutions analytiques existantes dans ces situations permettent de ne pas faire usage de simulations numériques et ainsi concentrer le propos sur les erreurs introduites par les formulations.

Dans le cas de la diffusion le long d'une ligne de longueur E ou dans un volume compris entre deux plans parallèles (couche mono-dimensionnelle infinie) espacés d'une distance E , le problème est à géométrie 1D, même si la marche aléatoire est 3D dans

la couche. L'équation de diffusion s'écrit donc :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau}(z, \tau) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho(z, \tau) \quad (2.70)$$

avec $D = \frac{v}{qk_s}$ coefficient de diffusion macroscopique défini par (2.43), le paramètre q représentant la dimension de la marche aléatoire (1 pour la ligne, 3 pour la couche) et v la vitesse des particules supposée constante (c pour des photons). Avec $\rho(0, \tau) = \rho(E, \tau) = 0$, cette équation différentielle aux dérivées partielles admet pour solution générale :

$$\rho(z, \tau) = \sum_k C_k \sin\left(\frac{k\pi z}{E}\right) \exp^{-\left(\frac{k\pi}{E}\right)^2 \tau} \quad (2.71)$$

où C_k provient de l'identification en série de Fourier, son expression est :

$$C_k = \frac{2}{E} \int_0^E \sin\left(\frac{k\pi z}{E}\right) \rho(z, 0) dz \quad (2.72)$$

Le terme $\rho(z, 0)$ correspond au type de distribution initiale utilisé ; dans le cas où la distribution initiale est un Dirac situé en $z = z_0$, la solution $\rho(z, \tau)$ se simplifie ainsi :

$$\rho(z, \tau) = \frac{2}{E} \sum_k \sin\left(\frac{k\pi z_0}{E}\right) \sin\left(\frac{k\pi z}{E}\right) \exp\left(-\left(\frac{k\pi}{E}\right)^2 \tau\right) \quad (2.73)$$

Comme le flux de particules sortant à la paroi d'une géométrie est directement relié au temps de résidence des particules, nous aurons besoin de l'expression de la densité de flux à la paroi $-D\mathbf{n} \cdot \nabla \rho(z, \tau)$ où \mathbf{n} est la normale sortante à la paroi. Ces flux sont directement reliés aux dérivés des expressions $\rho(z, \tau)$ précédentes prises en 0 ou E ⁸.

Explicitons par exemple la densité de flux à la frontière en $z = 0$ (l'expression en $z = E$ est parfaitement symétrique) :

$$\phi(0, \tau) = -D\mathbf{n} \cdot \nabla \rho(0, \tau) = \frac{2Dk}{\pi} E^2 \sum_k \sin\left(\frac{k\pi z_0}{E}\right) \exp\left(-\left(\frac{k\pi}{E}\right)^2 \tau\right) \quad (2.74)$$

La distribution des temps de séjour pour les particules qui démarrent de la source en z_0 et qui sortent en $z = 0$ est directement donnée par $\phi(0, \tau)$ (à une normalisation près). Bien sûr, le résultat est solution du problème approché pour lequel on a fait l'approximation de diffusion dans le champ et l'approximation $\rho(0, \tau) = \rho(E, \tau) = 0$ à la frontière du domaine. Une façon de tester la validité de ce résultat est de comparer une grandeur caractéristique de la distribution, nous choisissons de tracer le temps moyen de sortie des particules en fonction de leur position initiale donnée par le Dirac. Le graphe 2.9 montre l'erreur relative par rapport à une solution de référence obtenue par la méthode de Monte-Carlo (qui simule le problème sans approximation de

8. Les expressions analytiques ne sont pas mentionnées, la grandeur utile par la suite étant intégrée selon τ et faisant l'objet de simplification plus poussée.

diffusion). On observe que l'erreur relative est relativement faible dans le champ, de l'ordre de 1% mais tend vers 100% lorsque l'on s'approche des parois. Or la modélisation d'un problème de premier retour est justement le cas où les particules démarrent de la frontière! Dans ce cas là, d'après l'approximation de diffusion les particules passent un temps nul à l'intérieur du domaine (limite Brownienne). En général, pour essayer quand même d'obtenir un ordre de grandeur, les utilisateurs positionnent le Dirac à une distance de l'ordre du libre parcours moyen. On voit clairement dans cette illustration simple les limites d'une utilisation de l'approximation de diffusion pour traiter ce genre de problème. Il ne s'agit pas de donner toutes les astuces qui ont été mises en oeuvre pour attaquer cette difficulté mais plus de faire sentir le point délicat. On donne pour information, essentiellement pour la suite du document, le cas où la

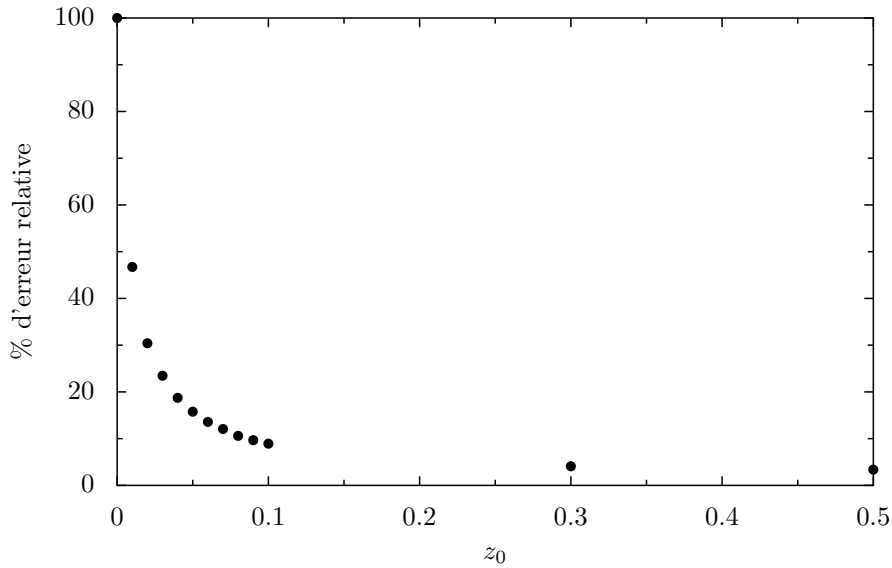


FIGURE 2.9.: Erreur relative de l'évaluation du temps de sortie d'un dirac $\langle t \rangle$ suivant une modélisation par approximation de diffusion par rapport à une simulation de Monte-Carlo à 10^6 générations aléatoires.

distribution initiale est constante de valeur $1/E$ pour tout z , la solution $\rho(z, \tau)$ est :

$$\rho(z, \tau) = \frac{2}{E} \sum_k \left[\int_0^E \sin\left(\frac{k\pi z}{E}\right) dz \right] \sin\left(\frac{k\pi z}{E}\right) \exp\left(-\left(\frac{k\pi}{E}\right)^2 \tau\right) \quad (2.75)$$

Chapitre 3.

Réécriture des problèmes de premier retour en problèmes de premier passage

Nous avons vu au chapitre précédent que les problèmes de premier retour posent un certain nombre de difficultés, lors de leur analyse et lors de leur simulation numérique. Nous allons voir dans ce chapitre comment, dans certaines configurations, un problème de premier retour peut être transformé en un problème de premier passage « équivalent ». Néanmoins, avant d'aborder pleinement cette question, nous allons commencer par décrire la propriété d'invariance dont l'identification a ouvert la porte vers cet ensemble de questions.

3.1. Invariance de la moyenne des longueurs des chemins de premiers retour : $\langle L \rangle = 4V/S$

A notre connaissance, la propriété d'invariance qui sert de point de départ à l'ensemble des analyses statistiques présentées dans ce chapitre a été identifiée pour la première fois par J.N. Bardsley et A. Dubi en 1981 et a été publiée dans une revue de Mathématiques [2]. Cependant ce résultat n'a pas été relevé dans la littérature suivante, ni en Mathématique, ni en Physique. Je rappelle ici rapidement les conditions dans lesquelles ce résultat a été retrouvé en 2003 par S. Blanco et R. Fournier [4].

Il s'agissait à l'origine d'un travail concernant l'analyse des phénomènes de morphogénèse auto-organisée dans les sociétés d'insectes. Dans l'expérience de laboratoire considérée, des fourmis agrégeaient des cadavres de fourmis sur une surface plane jusqu'à fabriquer des cimetières, comme elle le font dans la nature de façon à ne pas être gênées par les phéromones dégagées par les nombreux cadavres apparaissant au sein d'une colonie de grande taille. Lors de l'étude de cette expérience, les fourmis vivantes étaient supposées suivre une marche aléatoire de diffusion (des successions de lignes droites de longueur distribuée exponentiellement et des changements de directions selon une fonction de phase très orientée vers l'avant). Les caractéristiques de cette marche aléatoire (libre parcours moyen, paramètre d'asymétrie de la fonction de phase) avaient été mesurées expérimentalement en suivant des fourmis se déplaçant

sur la surface en l'absence de cadavres. L'hypothèse était alors faite que la présence des cadavres ne modifiait pas cette marche aléatoire, notamment que les fourmis continuaient à suivre la même marche aléatoire lorsqu'elles se déplaçaient sur les tas de cadavres (sur les cimetières).

Or le modèle résultant n'était pas prédictif en ce qui concernait la taille des agrégats de cadavres émergents : les agrégats prévus étaient nettement plus petits que ceux observés expérimentalement. On suspecte aujourd'hui que la raison de cet écart est un comportement de suivi des bords des agrégats (thèse en cours de Sébastian Weitz au LAPLACE et au CRCA), mais lors des premiers travaux il était possible d'imaginer que cet écart venait d'une mauvaise représentation de la marche aléatoire des fourmis sur les agrégats. Or il était impossible d'étudier expérimentalement cette marche aléatoire car les procédures de tracking à partir des enregistrements vidéo ne fonctionnaient plus dès qu'une fourmi montait sur un agrégat : la fourmi vivante était très difficile à distinguer visuellement des fourmis mortes sur lesquelles elle se déplaçait. Cette question a donc été explorée à l'aide du modèle : le libre parcours moyen et la fonction de phase ont été modifiées arbitrairement sur les agrégats et on étudiait l'influence de ces paramètres sur la taille des agrégats formés. Et il a été observé que la taille des agrégats était très peu sensible à la marche aléatoire.

Pour tenter de comprendre cette faible sensibilité, une série d'expériences numériques (méthode de Monte-Carlo) ont été menées de façon à déterminer le temps moyen passé par une fourmi sur un agrégat donné et de voir comment ce temps changeait lorsque l'on modifiait le libre parcours moyen et le paramètre d'assymétrie de la fonction de phase (supposée de forme elliptique). Les agrégats considérés étaient circulaires et les fourmis étaient supposées entrer uniformément et de façon isotrope à la frontière. Le résultat des simulations était très parlant : le temps moyen passé par les fourmis sur l'agrégat était indépendant de la marche aléatoire. On obtenait le même résultat avec des fourmis se déplaçant en ligne droite qu'avec des fourmis ayant un libre parcours très petit devant le rayon de l'agrégat. La fonction de phase n'avait pas plus d'influence. Comme les fourmis se déplaçaient à vitesse constante, le résultat pouvait se dire en terme de moyenne des longueurs des chemins parcourus sur l'agrégat entre l'entrée et la sortie (problème de premier retour à la frontière). Cette longueur moyenne simulée était égale à $\frac{\pi}{4}D$ où D est le diamètre de l'agrégat.

Avant d'en obtenir une preuve théorique, cette propriété d'invariance a d'abord été testée dans d'autres contextes et notamment en transfert radiatif. Des simulations de Monte-Carlo ont été effectuées dans lesquelles des photons entraient uniformément de façon isotrope à la frontière de surface S d'un domaine de volume V , le milieu étant purement diffusant. Les résultats de simulation indiquaient que la moyenne des longueurs des chemins parcourus dans le domaine avant sortie était $\langle L \rangle = 4\frac{V}{S}$, indépendamment du libre parcours moyen et de la fonction de phase.

Il y a deux raisons simples pour lesquelles cette propriété d'invariance peut paraître contre-intuitive en première analyse. La première raison est liée au fait que selon l'approximation de diffusion la longueur moyenne des trajectoires de diffusion multiple reliant deux points A et B varie comme d^2/λ^* où d est la distance entre les deux points et λ^* le libre parcours moyen de transport. On pourrait donc s'attendre à ce que la

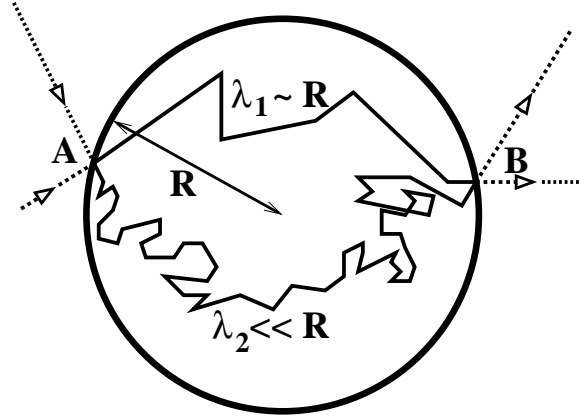


FIGURE 3.1.: Trajectoires de diffusion multiple sur un plan entre deux points A et B de la frontière d'un disque de rayon R . La première trajectoire est typique d'une marche aléatoire avec un libre parcours moyen λ_1 de l'ordre de R et une fonction de phase isotrope. La seconde correspond à un libre parcours moyen nettement inférieur. Cette figure illustre le raisonnement conduisant à penser que $\langle L \rangle$ devrait être plus élevé dans le second cas que dans le premier.

longueur moyenne $\langle L \rangle$ augmente lorsque le libre parcours moyen diminue (voir Fig. 3.1) : si le libre parcours moyen est plus court les chemins sont plus longs du fait d'un nombre plus important de changements de direction.

La seconde raison est que lorsque l'on réduit le libre parcours moyen, la probabilité de ressortir du domaine après un trajet court augmente. Lorsque le libre parcours moyen devient très petit, on peut même négliger la courbure de la frontière et on voit tout de suite que la longueur des trajectoires de retour rapide diminue avec le libre parcours moyen de façon proportionnelle (voir Fig. 3.2). On voit que cette image, comme la précédente, nous invite à prévoir une évolution de $\langle L \rangle$ avec le libre parcours moyen. Cependant cette évolution est dans le sens inverse de la précédente.

En résumé, $\langle L \rangle$ augmenterait avec le libre parcours moyen car il y aurait de plus en plus de diffusions pour traverser le milieu et aller d'un point à l'autre de la frontière, et $\langle L \rangle$ diminuerait avec le libre parcours moyen car il y aurait de plus en plus de trajectoires courtes. Évidemment, si la propriété d'invariance de $\langle L \rangle$ existe, c'est du fait de la combinaison de ces deux images. Nous reprendrons ce point plus loin dans ce chapitre, lors de l'étude des moments d'ordres supérieurs, en le discutant en termes de compensation entre les chemins longs et les chemins courts.

La démonstration proposée dans [4] est austère (même si elle ne présente aucune difficulté) et elle ne sera pas rappelée ici. Nous nous contenterons de la reprendre dans le cas particulier du transfert radiatif en faisant appel au second principe de la Thermodynamique. Pour cela, imaginons que le système étudié est maintenant un milieu diffusant et absorbant isotherme (de volume V et de température T_V) entouré d'une paroi noire isotherme (de surface S et de température T_S). Dans le cas particulier où

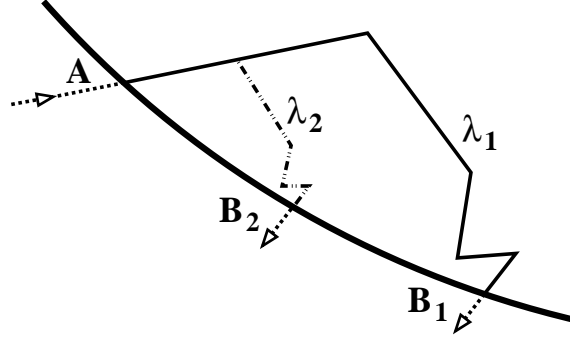


FIGURE 3.2.: Illustration de la réduction des longueurs des chemins courts lors d'une réduction du libre parcours moyen pour un même ensemble d'événements statistiques. La seconde trajectoire correspond à un libre parcours moyen divisé par deux par rapport à la première trajectoire ($\lambda_2 = \lambda_1/2$) et on voit que dans ce cas, si on néglige la courbure de la frontière, la longueur de la seconde trajectoire est approximativement divisée par deux par rapport à celle de la première ($L_2 \approx L_1/2$).

les deux températures sont égales ($T_V = T_S = T$) le second principe de la Thermodynamique nous dit que la puissance $\Phi_{V \rightarrow S}$ du rayonnement émis par le volume V et absorbé par la surface S doit être égale à la puissance $\Phi_{S \rightarrow V}$ du rayonnement émis par S et absorbée par V . Si le milieu a des propriétés d'absorption uniformes (coefficient d'absorption k_a indépendant de la position), et si le milieu peut être supposé optiquement mince en absorption, alors ces deux puissances peuvent s'écrire formellement de façon très simple. Nous savons en effet que la puissance totale émise par le volume V est $4\sigma T^4 V$ et sous l'hypothèse d'un milieu mince la quasi intégralité de ce rayonnement parvient à la frontière. On obtient donc

$$\Phi_{V \rightarrow S} = 4k_a \sigma T^4 V \quad (3.1)$$

En ce qui concerne la surface, la puissance totale émise est $\sigma T^4 S$ et selon la loi de Beehr la fraction absorbée par le volume correspond à l'intégrale sur tous les chemins de longueur l de la quantité $1 - \exp(-k_a l)$, ce qui conduit à

$$\Phi_{S \rightarrow V} = \sigma T^4 S \int_0^\infty [1 - \exp(-k_a l)] p_L(l) dl \quad (3.2)$$

où p_L est la densité de probabilité des longueurs de chemin depuis la frontière, avec une incidence isotrope (car la luminance émise par la surface noire est bien isotrope), jusqu'à la première sortie, c'est à dire que p_L caractérise bien la statistique des longueurs que nous cherchons à étudier. Ceci est vrai quelque soit l'épaisseur optique, mais si nous plaçons comme précédemment à la limite optiquement mince en absorption nous pouvons écrire $1 - \exp(-k_a l) \approx k_a l$ et retenir

$$\Phi_{S \rightarrow V} = \sigma T^4 S \int_0^\infty k_a l p_L(l) dl = \sigma T^4 S k_a \langle L \rangle \quad (3.3)$$

En comparant les équations 3.1 et 3.5 nous obtenons

$$4k_a\sigma T^4V = \sigma T^4 S k_a < L > \quad (3.4)$$

soit

$$< L > = 4 \frac{V}{S} \quad (3.5)$$

En nous plaçant à la limite mince, nous avons raisonné de façon approchée, mais il n'est pas difficile de montrer que ce résultat est rigoureusement exact lorsque l'on explicite complètement le passage à la limite $k_a \rightarrow 0$ [4].

3.2. Reprises et extensions

Ce résultat a été à la fois repris en tant que tel dans différents domaines d'application, et a été étendu à d'autres conditions à la frontière et d'autres marches aléatoires. Tout d'abord, il a été repris dans le champs des mathématiques où il a été interprété comme une extension de la propriété de Cauchy. Il a en effet été démontré par Cauchy que si on considère un ensemble de demi-droites ayant pour origine un point sur la frontière d'un domaine convexe, et orientées vers l'intérieur du domaine, alors si les origines sont distribuées uniformément sur la frontière et si les directions sont distribuées de façon isotrope sur l'hémisphère entrant (ce qui correspond à une distribution lambertienne lors qu'on la considère en termes de flux), la moyenne des longueurs des segments intersectant le domaine est égale à $4V/S$. Il s'agit donc exactement du même résultat que précédemment dans le cas particulier d'un libre parcours moyen infini (particules se déplaçant en ligne droite)¹. La propriété précédente a donc été perçue comme une extension de la formule de Cauchy, tout d'abord pour les domaines non convexes (car rien n'a été dit concernant la convexité dans la démonstration précédente), puis pour l'ensemble des marches aléatoires de diffusion (plutôt que la seule ligne droite) [30, 31, 33, 34].

Elle a ensuite été reprise en Physique et notamment en neutronique [32]. La façon de l'utiliser dans ce contexte peut facilement être transposée dans le domaine du transfert radiatif : Considérons par exemple une chambre combustion dans laquelle le gaz est bien brassé et que l'on peut donc supposer quasi-isotherme à une température T_C et de propriétés radiatives homogènes (le coefficient d'absorption monochromatique $k_{a,\nu}$ notamment). Supposons également que les parois sont noires et isothermes à une température T_F plus froide. Alors avec les mêmes notations que celles employées dans la démonstration précédente, la puissance nette échangée entre le gaz et les parois (le refroidissement net du gaz vers la paroi) s'écrit

$$\Psi_\nu = [L_\nu^0(T_C) - L_\nu^0(T_F)] \int_0^\infty [1 - \exp(-k_a l)] p_L(l) dl \quad (3.6)$$

1. Ce résultat est également connu en Physique sous le nom de propriété de la moyenne des cordes [38].

Si maintenant, on peut faire l'hypothèse que le long de chaque chemin optique de multi-diffusion le milieu est mince en absorption, alors il vient directement

$$\Psi_\nu \approx [L_\nu^0(T_C) - L_\nu^0(T_F)] \langle L \rangle = 4 \frac{V}{S} [L_\nu^0(T_C) - L_\nu^0(T_F)] \quad (3.7)$$

On voit donc que dans de nombreuses situations où les interactions particulières de type absorption sont peut fréquentes par rapport aux interactions de type diffusion, des calculs analytiques approchés peuvent être menés en diffusion multiple. Or les phénomènes de diffusion multiple sont justement réputés difficiles à analyser du fait du faible nombre de résultats quantitatifs simples disponibles (sauf sous l'approximation de diffusion aux fortes épaisseurs optiques de diffusion). De ce point de vue, en rayonnement comme dans d'autres contextes, la propriété d'invariance de la moyenne des longueurs a donc une valeur à la fois quantitative et théorique.

Pour la même raison, la propriété $\langle L \rangle = 4 \frac{V}{S}$ est immédiatement utile lors des exercices de validation des codes de calcul en diffusion multiple. Vincent Eymet a notamment très intensément exploré cette propriété lors de la validation des codes de Monte-Carlo qu'il a développé pour la simulation du rayonnement dans les atmosphères planétaires (Code Karine [16] et prochaine extension en 3D « planet_EMCC »²). Indubitablement, lorsqu'un code de Monte-Carlo est compatible aux barres d'erreurs statistiques prêt avec une grandeur intégrale telle que $\langle L \rangle = 4 \frac{V}{S}$ dans l'ensemble de la gamme des épaisseurs optiques de diffusion et pour tout type de fonction de phase, alors une grande confiance peut être accordée à l'ensemble des algorithmes employés et leurs comportements numériques en configurations extrêmes.

Enfin, $\langle L \rangle = 4 \frac{V}{S}$ a été repris en biologie, pour des problèmes très voisins des conditions de son établissement. Nous avons vu que la marche aléatoire de diffusion est souvent employée pour modéliser les déplacements d'animaux. Or il n'est pas toujours facile de valider cette hypothèse expérimentalement et notamment de repérer des conditions où d'autres phénomènes interviennent, par exemple la présence d'une piste chimique pour les insectes, ou tout autre mécanisme d'orientation. Il est également difficile de repérer des phénomènes de type thigmotactisme où les animaux suivent des repères géométriques, des infractuosités, des bords, etc. Par exemple, dans l'expérience d'agrégation de cadavres que nous avons discuté au dessus, dès lors que les agrégats sont formés, les fourmis continuent-elles à suivre une marche aléatoire de diffusion (avec éventuellement un libre parcours et fonction de phase modifiés), ou bien suivent-elles le bord des agrégats? Lorsque la réponse est évidente visuellement, il n'y a pas de difficulté. Mais lorsqu'une fraction seulement des fourmis suivent le bord, les autres continuant à suivre une marche aléatoire de diffusion, comment repérer concrètement ce phénomène sans mettre en oeuvre une expérience dédiée longue et délicate? Mélanie Challet [8, 9] s'est posée cette question et a proposé une technique expérimentale simple fondée sur la propriété d'invariance que nous discutons, utilisant les tracking vidéos existants, de façon à repérer des situations problématiques. Grossièrement, elle teste si $\langle L \rangle = 4 \frac{V}{S}$ est satisfait ou non : si c'est le cas, cela ne lui permet pas de

2. Contact : v.eymet@gmail.com - <http://web.lmd.jussieu.fr/~eymet/>

conclure que la marche aléatoire est bien de type diffusion, mais si au contraire ce n'est pas le cas, alors avec certitude le modèle de la marche aléatoire de diffusion n'est pas valable. Cela lui a notamment permis de repérer des conditions pour lesquelles les fourmis utilisaient des pistes dans leur déplacement, des pistes qui ont ensuite pu être visualisées par d'autres moyens.

Au delà de la reprise directe de $\langle L \rangle = 4\frac{V}{S}$ dans différents contextes, cette propriété a également été étendue dans deux directions par l'équipe d'Olivier Bénichou [3]. Ils ont tout d'abord montré que cette propriété pouvait être étendue à des situations différentes d'entrée et de sortie à la frontière. Supposons par exemple que les particules ne peuvent entrer que par une fraction f de la frontière (toujours uniformément et de façon isotrope) et que la fraction restante est réfléchissante, c'est à dire que les particules impactant la frontière depuis l'intérieur du domaine sont réfléchies vers l'intérieur du domaine. Alors on peut montrer que la moyenne des longueurs devient $\langle L \rangle = 4\frac{V}{fS}$. Cette longueur est bien sûr plus longue car les réflexions rallongent les chemins parcourus dans le domaine. La démonstration de cette extension est triviale lorsqu'on la considère sous l'angle du transfert radiatif comme nous l'avons fait précédemment : il suffit de recréer un équilibre à la limite mince avec une partie de la paroi qui est purement réfléchissante et qui n'émet donc aucun rayonnement à l'équilibre. On voit donc facilement que cette propriété peut être également étendue à des parois partiellement réfléchissantes (réflectivité inférieure à 1). Mais Olivier Bénichou et son groupe ont proposé une extension beaucoup plus large dans laquelle ils considèrent des particules suivant une marche aléatoire plus générale que la marche aléatoire diffuse (transport linéaire à module de vitesse non constant, avec forces extérieures et un terme de diffusion Fickienne dans l'espace des vitesses), et dans laquelle la distribution d'incidence n'est plus uniforme et isotrope, mais correspond à une configuration stationnaire supposée connue. Ils étendent également la propriété en considérant la moyenne des temps parcourus dans un quelconque sous-domaine. La plus grosse originalité de leur travail concerne l'extension à des processus stochastiques autres que la marche aléatoire de diffusion et la possibilité d'utiliser n'importe quelle solution stationnaire existante (et non seulement l'équilibre comme nous l'avons vu dans la démonstration de $\langle L \rangle = 4\frac{V}{S}$) pour produire une nouvelle propriété d'invariance. Pour l'instant, à notre connaissance aucune mise en oeuvre pratique n'a été faite en dehors de la diffusion et de l'équilibre, mais ce résultat certainement très prometteur est intensément examiné au LAPLACE et au centre RAPSODEE de l'ENSTIMAC pour d'éventuelles applications radiatives et fluidiques.

Enfin, un dernier résultat très important mérite d'être mentionné à la suite de cette même propriété d'invariance. Nous en revenons à une marche aléatoire de diffusion. Alain Mazollo a démontré en 2004 une propriété qui joue un rôle essentiel dans la suite du présent travail [30]. A partir de la variable aléatoire L définie précédemment (longueur d'un chemin depuis la frontière jusqu'au retour à la frontière, pour une incidence uniforme et isotrope), il a proposé d'introduire une nouvelle variable aléatoire noté R . Celle-ci correspond à la longueur de chemins de multi-diffusion jusqu'à la traversée de la frontière, mais maintenant les chemins débutent uniformément au sein du volume, avec une direction initiale distribuée de façon isotrope (voir Fig. 3.3). La

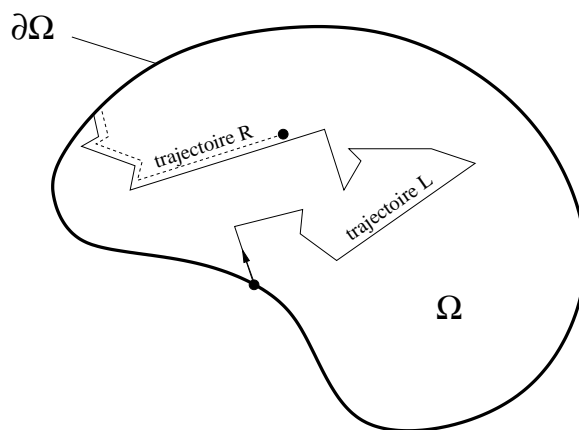


FIGURE 3.3.: Illustration des trajectoires correspondant aux variables aléatoires L et R .

variable aléatoire R correspond donc à un problème statistique de premier passage, et non pas de premier retour comme L , car les chemins correspondant à R partent de l'intérieur du domaine et sont suivis jusqu'au premier passage à la frontière, alors que les chemins correspondant à L partent de la frontière et sont suivis jusqu'au premier retour à la frontière. Alain Mazollo a alors montré la propriété suivante concernant les fonctions densités de probabilité p_L et p_R de L et R respectivement :

$$p_L = - \langle L \rangle p'_R \quad (3.8)$$

Cela signifie que si l'on connaît analytiquement la distribution de R , alors comme $\langle L \rangle$ est connue, la distribution de L est également connue, et réciproquement. Cette propriété est établie rigoureusement à partir d'une démonstration que nous ne rappelons pas ici, mais à notre connaissance il n'a pas été proposé d'image physique simple permettant d'en comprendre l'origine. Il est par contre clair que l'ensemble des chemins correspondant à L sert de support pour l'ensemble des chemins correspondant à R (voir Fig. 3.3), mais il n'est pas pour autant facile d'établir un lien intuitif entre les deux fonctions densité de probabilité. Reste que nous utiliserons beaucoup cette propriété dans tout ce qui nous conduira à l'analyse des moments de L d'ordre supérieur.

3.3. Moyenne d'une fonction $f(L)$ en fonction des chemins de type R

Nous avons vu dans le paragraphe précédent la relation de Mazollo (3.8) liant les densités de probabilités p_L et p_R en fonction des chemins de type L et R . D'autre part, il a été montré que le moment d'ordre 1 en L est un invariant qui ne dépend que de la géométrie $\langle L \rangle = 4V/S$. Pour le calcul de la moyenne d'une fonction quelconque $\langle f(L) \rangle$, si on applique la définition du calcul de la moyenne comme espérance d'une

fonction et si l'on applique la relation 3.8, on obtient

$$\langle f(L) \rangle = \int_0^{+\infty} p_L(l) f(l) dl = \int_0^{+\infty} - \langle L \rangle p'_R(l) f(l) dl \quad (3.9)$$

et en intégrant par parties, pourvu que les limites $(p_R f)_0 = \lim_{x \rightarrow 0} p_R(x) f(x)$ et $(p_R f)_{+\infty} = \lim_{x \rightarrow +\infty} p_R(x) f(x)$ soient définies, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle f(L) \rangle &= \langle L \rangle \left[\int_0^{+\infty} p_R(r) f'(r) dr + (p_R f)_0 - (p_R f)_{+\infty} \right] \\ &= \langle L \rangle [\langle f'(R) \rangle + (p_R f)_0 - (p_R f)_{+\infty}] \end{aligned} \quad (3.10)$$

Il est à noter que cette relation (3.10) permet de remplacer un problème de **premier retour** par un problème de **premier passage**, ce qui permet de s'affranchir de la difficulté d'utilisation de l'approximation de diffusion dans les problèmes de premier retour. En effet $\langle f(L) \rangle$ est remplacé par une expression dans laquelle la seule espérance intervenant est $\langle f'(R) \rangle$ qui porte sur la variable aléatoire R .

Appliquons la relation précédente au cas particulier $f = 1$, on obtient alors $P_R(0) = \frac{1}{\langle L \rangle}$. Introduisons maintenant cette dernière relation dans l'équation 3.10 et introduisons également la notation R^{diff} pour les chemins de type R sur lesquels est appliquée l'approximation de diffusion. R^{diff} correspond donc à la variable aléatoire R à laquelle on applique l'approximation de diffusion. Nous obtenons ainsi la relation suivante :

$$\langle f(L) \rangle \approx \langle L \rangle \langle f'(R^{diff}) \rangle + f_0 + (p_R f)_{+\infty} \quad (3.11)$$

A partir de ce stade, comme nous avons remplacé R par R^{diff} , les expressions ne sont plus rigoureusement exactes. Mais comme R correspond à un problème de premier passage, l'approximation de diffusion devient exacte à la limite $K_n \rightarrow 0$ (car le poids des chemins courts tend vers zéro) et les expressions que nous obtenons ont valeurs de comportement asymptotique. Nous retenons donc que pour toute fonction f appartenant à l'ensemble des fonctions vérifiant $(p_R f)_{+\infty} = 0$, $\langle L \rangle$ étant une grandeur connue, avec l'équation 3.11 nous avons une relation permettant d'estimer $\langle f(L) \rangle$ par une application de l'approximation de diffusion à la limite des faibles K_n .

3.4. Application à un monôme de degré n

Nous allons maintenant illustrer cette méthodologie par le choix d'un exemple de fonction jouant un rôle de premier plan lors de l'analyse de toute distribution : le monôme de degré n , soit $f(L) = L^n$. En appliquant l'approximation (3.11) à cette fonction, on obtient :

$$\langle L^n \rangle \approx \langle L \rangle n \langle (R^{diff})^{n-1} \rangle \quad (3.12)$$

La définition de la moyenne de la fonction aléatoire $(R^{diff})^{n-1}$, sachant que p_R^{diff} est une fonction densité de probabilité vérifiant $\int_0^{+\infty} p_R^{diff}(r) dr = 1$, est :

$$\langle (R^{diff})^{n-1} \rangle = \int_0^{+\infty} p_R^{diff}(r) r^{n-1} dr \quad (3.13)$$

Sachant que les variables spatiale r et temporelle t sont liées par la vitesse v par la relation $r=vt$, nous pouvons introduire le changement de variable suivant³ :

$$\begin{aligned} dr &= v dt \\ p_R^{diff}(r) &= \frac{1}{v} p_T^{diff}(t) \end{aligned}$$

En introduisant le changement de variable en t , correspondant au temps de séjour des particules depuis leur émission dans le domaine de travail Ω jusqu'à leur sortie, on obtient :

$$\langle L^n \rangle = \langle L \rangle \int_0^{+\infty} p_T^{diff}(t) (vt)^{n-1} dt \quad (3.14)$$

Un second changement de variable en τ est effectué, $\tau = Dt$ où apparaît le coefficient de diffusion macroscopique $D = \frac{v}{qk^*}$, avec q représentant la dimension du système⁴, et k^* est l'inverse du libre parcours moyen de transport l^* défini dans le chapitre 2. Nous obtenons ainsi la moyenne des longueurs en fonction de τ :

$$\langle L^n \rangle = \langle L \rangle n q^{n-1} (k^*)^{n-1} \int_0^{+\infty} p_T^{diff}(\tau) \tau^{n-1} d\tau \quad (3.15)$$

Nous allons introduire maintenant un paramètre purement géométrique qui sera utilisé dans tout ce qui suit en posant :

$$\alpha_n = \langle L \rangle n q^{n-1} \int_0^{+\infty} p_T^{diff}(\tau) \tau^{n-1} d\tau \quad (3.16)$$

Il vient alors une relation qui sera essentielle pour la suite du manuscrit et qui traduit que le moment d'ordre n des chemins est proportionnelle au coefficient k^* à la puissance $n-1$.

$$\langle L^n \rangle \approx \alpha_n (k^*)^{n-1} \quad (3.17)$$

Comme nous l'avons défini précédemment $p_T^{diff}(\tau)$ est la densité de probabilité du temps de séjour dans le domaine étudié, sous l'approximation de diffusion, avec le changement de variable $\tau = Dt$. Cela correspond à la distribution des temps de résidence de particules émises selon une distribution initiale uniforme et dont les lois de transport obéissent à l'approximation de diffusion. Il en vient d'après ce qui vient d'être défini que (en supposant que toutes les particules sont émises simultanément à l'instant $\tau = 0$) :

$$p_T^{diff}(\tau) = \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho|_{\mathbf{y},\tau} d\mathbf{y} \quad (3.18)$$

où $\rho(\mathbf{x}, \tau)$ est la densité de particules solution de l'équation de diffusion $\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = -\nabla^2 \rho$. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, les conditions de résolution de cette équation de diffusion sont à écrire en fonction du problème traité. Pour nous ici, la densité initiale est uniforme car il s'agit de représenter la variable aléatoire R en considérant que toutes les particules sont émises au même temps initial $\tau = 0$. Pour la condition aux limites, nous savons qu'aucune particule ne rentre dans le milieu ce qui

3. La vitesse de la marche aléatoire est considérée constante, comme dans le cas des photons.

4. pour une géométrie en 3D, $q=3$

peut être représenté grossièrement par l'imposition d'une densité nulle à la frontière. C'est ce qui a été proposé dans [5]. Les conditions initiales et limites sont donc définies par :

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{V} & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \rho(\mathbf{x}, \tau) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.19)$$

Ces conditions et leur pertinence, notamment celle de la condition à la limite, seront discutées de manière plus détaillée dans le chapitre 5.

3.5. Mise en oeuvre de l'approche dans un cas monodimensionnel

Nous reportons dans ce paragraphe les résultats obtenus dans le cas test de [5]. Celui-ci consiste en l'évaluation de α_1 et α_2 dans un milieu constitué de deux plans parallèles infinis séparés par une couche diffusante d'épaisseur δ . La fonction de phase est considérée isotrope, $l^* = \frac{1}{k^*}$ est constant. L'équation (3.17) permet d'écrire la dérivée $\partial_k^{n-1} \langle L^n \rangle \approx \alpha_n (n-1)!$ où α_n est donné par (3.16) avec utilisation de la solution analytique de l'équation de diffusion présentée dans la partie 2.4.2 dans l'expression (3.18) ($\alpha_1 = 2\delta$ et $\alpha_2 = \delta^3$). Le tableau ci-dessous fournit les solutions calculées par la méthode de Monte-Carlo comparées aux coefficients α_1 et α_2 obtenus analytiquement pour différentes épaisseurs optiques. Les dérivées $\partial_k \langle L^2 \rangle$ proviennent d'un calcul de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo [46] dont nous parlerons au chapitre suivant.

$k^*\delta = 1/Kn$	$\frac{\langle L \rangle}{\alpha_1}$	$\frac{\sigma_{\langle L \rangle}}{\alpha_1}$	$\frac{\partial_k \langle L^2 \rangle}{\alpha_2}$	$\frac{\sigma_{\partial_k \langle L^2 \rangle}}{\alpha_2}$
1	1.00004	2.44E-05	0.3334	1.40E-03
2	0.99998	2.22E-05	0.7522	1.07E-03
4	1.000003	3.42E-05	0.9135	1.21E-03
6	0.99997	4.05E-05	0.9578	1.52E-03
10	1.00004	5.10E-05	0.9833	2.32E-03
15	0.99992	5.12E-05	0.9884	3.55E-03

TABLE 3.1.: Calcul par Monte-Carlo de $\langle L \rangle$ and $\partial_k \langle L^2 \rangle$ pour une couche monodimensionnelle d'épaisseur δ . Le nombre de tirages est de 10^9 . $\sigma_{\langle L \rangle}$ et $\sigma_{\partial_k \langle L^2 \rangle}$ sont les écarts types associés (Résultats issus de [5]).

Deux observations sont faites sur ses résultats :

- À travers cet exemple, le résultat $\langle L \rangle = \alpha_1$ est mis en évidence, quelque soit la valeur de l'épaisseur optique. Ce résultat se justifie par la solution exacte du moment d'ordre 1 : $\langle L \rangle = 4V/S$ déjà démontrée dans [4].

- $\partial_k \langle L^2 \rangle \approx \alpha_2$ donne de bons résultats pour des épaisseurs optiques $1/K_n = k^* \delta$ grandes. Ceci correspond au fait que (3.17) n'est valable que pour des l^* petits par rapport à la dimension du système. On notera également que $\partial_k^{n-1} \langle L^n \rangle$ ne peut pas être estimé facilement par la méthode de Monte-Carlo pour $n > 2$. C'est donc sans contrôle possible que grâce à la méthodologie proposée, la résolution analytique de l'équation de diffusion fournit $\alpha_3 = \frac{9}{10} \delta^5$ et $\alpha_4 = \frac{153}{140} \delta^7$, ce qui offre deux prédictions rigoureuses de $\partial_k^2 \langle L^3 \rangle$ et $\partial_k^3 \langle L^4 \rangle$ respectivement, à la limite de K_n tendant vers zéro.

Chapitre 4.

Monte-Carlo, outil de référence

Dans un premier temps, nous allons effectuer quelques rappels théoriques dans le domaine des statistiques, puis nous aborderons la méthode de Monte-Carlo aux travers de deux approches complémentaires et équivalentes, à savoir les algorithmes de Monte-Carlo formulés de façon analogue et de façon intégrale. Nous nous intéresserons ensuite à l'implémentation du calcul de la sensibilité d'une grandeur à n'importe quel paramètre du problème au sein d'un algorithme de Monte-Carlo, sans pour autant augmenter significativement le temps de calcul de l'algorithme. Enfin, nous passerons en revue les optimisations mises à disposition par le domaine de la synthèse d'image. Nous terminerons par un ensemble d'exemples de simulation, en illustrant les problèmes de convergence associés à l'utilisation de cette méthode numérique dans le cadre de la simulation des chemins de premiers retours. Nous fixerons ainsi les limites au delà desquelles il nous sera impossible d'utiliser les algorithmes de Monte-Carlo pour produire des solutions de référence aux problèmes étudiés dans la présente étude.

En complément de ce chapitre, outre l'article de Metropolis [35], le lecteur intéressé par les méthodes de Monte-Carlo peut se référer aux ouvrages de Kalos & Whitlock [26] et Hammersley & Handscomb [20]. Gelbard & Spanier [18] présentent cette méthode dans le cadre du transport neutronique. Enfin, les ouvrages de Niederreiter ouvrent la discussion sur la génération aléatoire [27] ainsi que sur les méthodes dites « quasi-Monte Carlo » [39].

4.1. Présentation théorique : Quelques éléments de mathématiques

Les raisonnements utilisés dans les méthodes de Monte-Carlo ont pour socle la statistique. La compréhension des objets mathématiques mis en jeux est indéniablement une aide à la compréhension de ces méthodes. Nous nous proposons ici de rappeler les concepts de base de la statistique sans pour autant vouloir être exhaustif. Une présentation plus complète se trouve aisément dans la littérature mathématique [51, 24, 28].

Événement aléatoire et probabilité Un événement aléatoire A est un événement particulier pouvant se produire au sein d'un ensemble $\Omega = \{A, B, C, \dots\}$. Il est associé

à une probabilité $P(A)$, mesure de la chance d'apparition de cet événement particulier parmi l'ensemble des événements possibles Ω . Cette probabilité a une valeur comprise entre 0 et 1. Un événement impossible a une probabilité nulle, un événement certain possède une probabilité de 1.

On notera que $P(A + B + \dots)$ est la probabilité qu'au moins un des événements ait lieu, $P(AB)$ la probabilité que A et B se produisent et $P(A|B)$ la probabilité de A sachant que B s'est produit. On appelle cette dernière probabilité la probabilité conditionnelle de A sachant B . Lorsque $P(A|B) = P(A)$ alors les événements A et B sont indépendants, l'apparition de l'un n'affecte pas l'autre.

Variable et fonction aléatoire Une variable aléatoire est une fonction mesurable définie sur un espace de probabilités associant un processus aléatoire à ses résultats. Elle a généralement une valeur dans \mathbb{R} ou \mathbb{R}^n . Une variable aléatoire X est définie par son ensemble de réalisations $\{x_1, x_2, \dots, x_i, \dots\}$, qui est l'ensemble des valeurs que peut prendre la variable aléatoire, et par les probabilités $\{P_1, P_2, \dots, P_i, \dots\}$ associées. Une fonction aléatoire est une fonction d'une ou plusieurs variables aléatoires. Par exemple, $H(X, Y) = X + Y$ est une fonction des deux variables aléatoires X et Y . Chaque réalisation f_i de F correspond à la somme d'une réalisation x_i de X et d'une réalisation y_i de Y : $f_i = x_i + y_i$. L'ensemble de réalisations d'une variable aléatoire peut être discret ou continu. On parle de variable aléatoire discrète ou de variable aléatoire continue. Dans le cas d'une variable aléatoire continue, il est nécessaire d'étendre la notion de probabilité associée à une réalisation, ceci à l'aide des concepts de fonction de répartition et de fonction densité de probabilité.

4.1.1. Différentes fonctions caractérisant une variable aléatoire sur \mathbb{R}

Fonction de répartition On associe à une variable aléatoire X définie sur \mathbb{R} une fonction de répartition F . Pour chaque valeur de $x \in \mathbb{R}$, $F(x)$ est la probabilité qu'une réalisation de la variable aléatoire X prenne une valeur plus petite que x :

$$F(x) = P(X < x) \tag{4.1}$$

Cette fonction possède les propriétés suivantes :

1. $F(-\infty) = 0$
2. $F(+\infty) = 1$
3. F est une fonction croissante (non strictement dans le cas général)

On parle aussi de fonction de répartition cumulative ou de fonction cumulée (ceci pour des raisons simples associées aux propriétés intégrales rappelées plus loin).

Fonction de densité de probabilité La fonction de densité de probabilité est la dérivée de la fonction de répartition

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx} \geq 0 \tag{4.2}$$

Sans rentrer dans les détails, nous retiendrons que cette définition peut être étendue à des situations où F n'est pas dérivable (en particulier pour les variables aléatoires discrètes) grâce à la théorie des distributions et notamment à la distribution de Dirac. La densité de probabilité $f(x)$ s'interprète comme la « chance » de tirer la valeur exacte x . Bien que l'on ne puisse pas parler de la probabilité de x dans le cas d'une variable aléatoire continue, on peut toujours définir la probabilité qu'une réalisation de X tombe dans l'intervalle dx autour de x et la fonction f permet de quantifier cette probabilité comme $f(x)dx$. Plus généralement, du fait de la définition de f , l'intégrale $\int_a^b f(x)dx$ (pour toutes valeurs a et b telles que $a < b$ dans \mathbb{R}) est la probabilité $P(a < x < b)$ décrivant les « chances » de tirer la valeur d'une variable x dans un intervalle dx . A titre d'exemple, si X est définie sur $[0, 1]$ et si $F(x) = x$ alors $f(x) = 1$. La densité de probabilité étant constante sur $[0, 1]$ dans ce cas, on parle alors de fonction de densité de probabilité uniforme sur $[0, 1]$. Une fonction de densité de probabilité (ou p.d.f. pour *Probability Density Function*) doit être :

- Une fonction positive.
- Une fonction continue sauf en un nombre au plus dénombrable de points.
- Une fonction normalisée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1 \quad (4.3)$$

Si une variable aléatoire réelle X admet une densité f , alors :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \int_{-\infty}^x f(u)du = F(x)$$

ce qui est la raison pour laquelle on parle également de fonction cumulée pour la fonction de répartition.

Nous utiliserons parfois les notations pdf_X pour la fonction densité de probabilité de la variable aléatoire X et cdf_X pour sa cumulée, soit

$$cdf_X(x) = \int_{-\infty}^x pdf(u)d(u) \quad (4.4)$$

4.1.2. Analyse d'un processus aléatoire

Espérance et moments L'espérance \mathbf{E} d'une variable aléatoire continue X de fonction de répartition F , de fonction densité de probabilité f , définie sur \mathbb{R} est :

$$\mathbf{E}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx \quad (4.5)$$

On parle aussi de la valeur moyenne de la variable aléatoire X . On définit de la même façon la moyenne d'une fonction aléatoire H de X :

$$\mathbf{E}(H(X)) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x)f(x)dx \quad (4.6)$$

On peut définir une quantité m_p appelé moment d'ordre p de X :

$$\begin{aligned} m_p(X) &= \mathbf{E}(X^p) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^p f(x)dx \end{aligned} \quad (4.7)$$

Enfin le moment centré d'ordre p est défini par :

$$m_{c,p}(X) = \mathbf{E}[(X - \mathbf{E}(X))^p] \quad (4.8)$$

On notera que les moments peuvent ne pas être tous définis dès lors que l'intégrale $\int_{-\infty}^{\infty} x^p f(x) dx$ est non définie pour certaines valeurs de p .

Variance et écart-type Soit X une variable aléatoire réelle absolument continue, on notera :

$$Var(X) = \mathbf{E}[(X - \mathbf{E}(X))^2] \quad (4.9)$$

La variance $Var(X)$ de la variable aléatoire X est par définition le moment centré d'ordre 2 de X . On peut montrer que (Formule de Koenig) : $Var(X) = m_{c,2}(X) = \mathbf{E}(X^2) - (\mathbf{E}(X))^2$

L'écart-type est défini comme :

$$\sigma(X) = \sqrt{Var(X)} \quad (4.10)$$

Nous pouvons noter les propriétés suivantes où a et b sont des réels :

$$Var(aX + b) = a^2 Var(X)$$

$$\sigma(aX + b) = |a|\sigma(X)$$

La moyenne (moment d'ordre 1) et la variance d'une variable aléatoire x sont des grandeurs descriptives de cette variable : elles sont des mesures respectivement de la moyenne des réalisations possibles de x et de leur dispersion autour de cette valeur moyenne. Si une réalisation de X est utilisée pour estimer, ou "mesurer", la valeur moyenne, alors on peut associer l'écart-type à une incertitude associée à cette mesure.

Théorème de la limite centrale Enfin, l'espérance d'une variable aléatoire et l'écart-type entrent en jeu au sein du théorème de la limite centrale, essentiels à l'explication des bases théoriques de la méthode de Monte-Carlo. Ce théorème permet de donner un sens à la limite d'une suite de réalisations indépendantes d'une variable aléatoire :

Théorème (Théorème de la limite centrale). Soit une variable aléatoire X sur \mathbb{R} et soit S_N la variable aléatoire définie sur \mathbb{R} de la façon suivante : chaque réalisation s_N correspond à la somme de N réalisations indépendantes x_i de X :

$$s_N = \sum_{i=1}^N x_i \quad (4.11)$$

Alors lorsque N tend vers l'infini, la densité de probabilité de S_N tend vers une loi de Laplace-Gauss

- de valeur moyenne $m_{s_N} = N\mathbf{E}[X]$
- d'écart-type $\sigma_{s_N} = \sqrt{N} [Var(X)]^{1/2} = \sqrt{N}\sigma(X)$

Ce théorème sera utilisé au moment de la mise en oeuvre de la méthode de Monte-Carlo dans le cadre de la formulation intégrale (cf. 4.3.1).

4.1.3. Réalisations d'une variable aléatoire

Les méthodes de Monte-Carlo consistent à retrouver un phénomène physique à l'aide d'une description stochastique des événements affectant le système étudié. A partir des lois statistiques dirigeant l'apparition de ces événements, il faut pouvoir générer une grande quantité de réalisations individuelles. Nous allons décrire une méthode possible de génération de réalisations à partir d'une loi exprimée sous forme de fonction de densité de probabilité.

Loi de tirage

Nous admettons que nous disposons d'une technique permettant d'effectuer une séquence de réalisations aléatoires indépendantes de toute variable aléatoire uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Nous cherchons alors à construire une technique permettant d'effectuer une séquence de réalisations indépendantes d'une variable aléatoire X définie sur un intervalle $[a, b]$. Soit f la fonction densité de probabilité de la variable aléatoire X . On se propose d'utiliser la fonction cumulée F :

$$F(x) = \int_a^x f(u)du \quad (4.12)$$

Comme f est une fonction de densité de probabilité, l'image de la fonction cumulée appartient à $[0, 1]$ et la variable aléatoire $Y = F(X)$ est distribuée uniformément sur cet intervalle unité. On peut alors écrire $X = F^{-1}(Y)$ et obtenir une réalisation x de X en effectuant une réalisation y de Y (qui est uniforme sur $[0, 1]$) et en calculant x comme $x = F^{-1}(y)$. La contrainte de cette méthode de génération simple et peu coûteuse est de n'être utilisable que pour des fonctions de densité de probabilité de cumulées inversibles analytiquement, ou dont l'inversion numérique n'est pas trop coûteuse. De plus, il est nécessaire de disposer d'un générateur aléatoire uniforme sur $]0, 1[$ dont les propriétés statistiques soient satisfaisantes pour toutes les fonctions f rencontrées, ce qui est d'autant plus difficile que la fonction F^{-1} varie fortement sur des faibles intervalles. Cette méthode est applicable dans le cas de l'échantillonnage d'une variable aléatoire vectorielle. On se ramène au tirage aléatoire de plusieurs variables scalaires qui constituent le vecteur, tout en veillant à respecter la fonction densité de probabilité de la variable vectorielle. Par exemple dans le cas du tirage d'une direction \mathbf{u} dans un système de coordonnées sphériques, on décompose la direction en deux angle θ et ϕ et on écrit

$$p_{\mathbf{U}}(\mathbf{u})d\mathbf{u} = p_{\Theta}d\theta p_{\Phi|\theta}d\Phi \quad (4.13)$$

où p_{Θ} est la densité de probabilité de θ indépendamment de Φ et $p_{\Phi|\theta}$ est la densité de probabilité de Φ pour une valeur connue de θ .

Générateur aléatoire

Lors d'une simulation par une méthode de Monte-Carlo, il est nécessaire de générer un très grand nombre de valeurs aléatoires afin de calculer les réalisations des

événements simulés. Ces valeurs aléatoires sont nommées nombres pseudo-aléatoires. Le but de ce paragraphe n'est pas de décrire les méthodes utilisées dans la mise au point des générateurs aléatoires uniformes sur $[0, 1]$ qui servent comme point de départ. Nous nous contenterons de remarquer que nous disposons de processus informatiques permettant de générer des suites de nombres d'apparence aléatoire. En fait, ces suites résultent de processus parfaitement non aléatoires, reproductibles à partir d'un état donné du générateur. Le caractère reproductible des suites est d'un intérêt primordial : Quoiqu'il soit possible de créer des processus générateurs réellement imprévisibles, cette solution n'est jamais choisie, les suites générées pouvant à terme présenter des caractéristiques statistiques non souhaitées. Ainsi, les propriétés statistiques d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires doivent être parfaitement maîtrisées.

Une suite de nombres pseudo-aléatoires n'est jugée satisfaisante qu'à la lumière de son application. En effet, il est souvent inutile et trop coûteux en temps de calcul d'utiliser des routines extrêmement robustes de génération, seule la validation de critères bien précis est nécessaire. Le plus important d'entre-eux est la périodicité de la méthode de génération : la méthode initiale de von Neumann [52], basée sur la manipulation de suite de nombres élevés au carré a été abandonnée pour la trop courte période des suites obtenues, pouvant dans le pire des cas se réduire à un singleton. Il est bon de noter que les générateurs modernes ont une limite structurelle sur la période des nombres pseudo-aléatoires générés : La méthode de codage des nombres réels en informatique ne permet de représenter qu'une quantité limitée de nombres. La période de certaines méthodes peut enfin être plus courte pour des raisons propres au processus de génération, comme le rejet de nombres afin d'assurer une condition spécifique.

Le type d'applications couvert par le présent travail nécessite de très grands nombres de générations aléatoires ; un second critère important est alors la vitesse de génération. Dans une simulation par Monte-Carlo, la plus grande partie du temps de calcul est consacrée à la génération des réalisations aléatoires, il faut alors choisir un compromis entre qualité de génération et rapidité d'exécution selon les objectifs qualitatifs des simulations.

En dehors de l'application spécifique qu'il est fait des générateurs aléatoires au sein des méthodes de Monte-Carlo, les générateurs aléatoires doivent impérativement vérifier d'autres critères dont deux fondamentaux :

- L'uniformité de la distribution. Comme il a été vu lors de la discussion sur la réalisation d'une variable aléatoire à l'aide de la fonction cumulée, tout l'intervalle $]0, 1[$ doit être balayé de la même façon, suivant une densité de probabilité constante et uniforme.
- L'indépendance des tirages. Il ne doit exister aucune corrélation entre chacun des tirages d'une séquence de nombres pseudo-aléatoires vis à vis de tous les autres tirages de la même séquence.

Actuellement toutes les librairies de base des langages informatiques fournissent des routines de génération aléatoire. Cependant, elles sont souvent de piètres qualités dans le cadre d'applications des méthodes de Monte-Carlo. A contrario, peu de générateurs

pseudo-aléatoires passent la totalité des tests de la procédure « DIEHARD » [29]. Nous devons faire appel à des routines extérieures développées spécifiquement pour le calcul numérique. On peut citer à ce titre la GNU Scientific Library (GSL), une collection de routines pour le calcul scientifique comprenant les générateurs aléatoires *Mersenne Twister* et *RANLUX* conciliant rapidité d'exécution et grande période.

4.2. Approche analogue

Nous allons maintenant illustrer un algorithme de Monte-Carlo déduit d'une approche analogue : Cette approche consiste en une description pas-à-pas des événements nécessaires à la simulation d'une grandeur et de l'expression de ses événements sous forme de fonctions de densité de probabilité.

Nous allons nous intéresser au problème suivant (cf. graphe 4.1) : Soit une couche mono-dimensionnelle d'épaisseur e dans la direction \mathbf{z} . Le milieu est non absorbant et est diffusant isotropiquement ; le caractère diffusif est donc totalement défini par le coefficient de diffusion k_s , inverse du libre parcours moyen l . On suppose que ce milieu est homogène, c'est à dire que les propriétés diffusives (k_s) sont uniformes dans le domaine d'étude. De même, les variations spectrales seront ignorées, ce point n'apportant aucune information ou difficulté supplémentaire dans le cadre de cette présentation. Nous nous placerons donc dans un cas d'étude monochromatique. Nous allons simuler le trajet optique de photons émis sur l'une des faces jusqu'à sa sortie à la première traversée de la frontière définie par les deux faces de la couche. La grandeur que nous cherchons à calculer est la longueur moyenne du trajet de diffusion. L'algorithme de Monte-Carlo correspondant est une simulation de N trajets, une évaluation de leur longueur L et un calcul de la moyenne sur les N réalisations. Nous appellerons $\langle L \rangle$ cette grandeur finale, moyenne sur les N réalisations L_j . Ce problème servira de fil rouge dans la présentation des optimisations et manipulations possibles au sein des méthodes de Monte-Carlo.

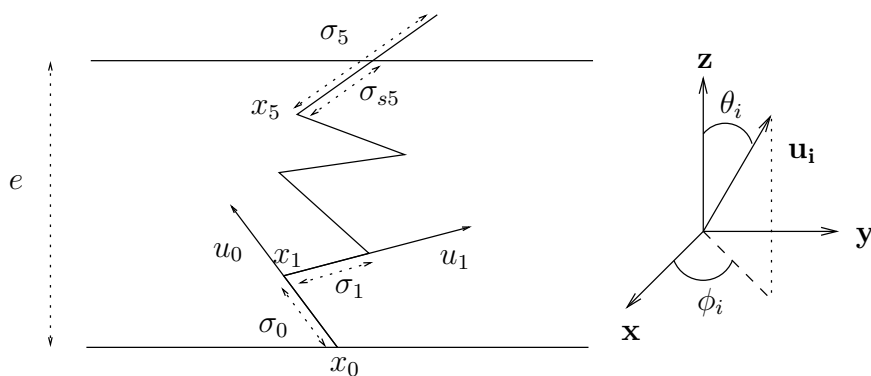


FIGURE 4.1.: Calcul de la longueur d'un trajet de diffusion dans une couche mono-dimensionnelle.

4.2.1. Direction d'émission

Les parois délimitant le domaine sont supposées noires et isothermes, tous les points d'émission de la surface d'entrée sont donc équivalents, on peut alors débiter une trajectoire de diffusion depuis un point quelconque : on choisit par simplicité de toujours partir du même point \mathbf{x}_0 . La génération d'une réalisation du trajet optique débute alors par le choix d'une direction d'incidence à l'entrée dans la couche. Dans le cas d'une incidence isotrope, la génération aléatoire de la direction $\mathbf{u}_0(\theta_0, \phi_0)$ s'effectue par un tirage selon une fonction de densité de probabilité issue de la loi de Lambert :

$$p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) = \frac{\cos \theta_0}{\pi} \quad (4.14)$$

où θ_0 est l'angle polaire compris dans $[0, \frac{\pi}{2}]$ et $\phi_0 \in [0, 2\pi]$ l'angle azimutal. Il faut donc définir ces deux angles au préalable. De la relation précédente on peut écrire :

$$p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0)d\mathbf{u}_0 = \frac{\cos \theta_0}{\pi} \sin \theta_0 d\phi_0 d\theta_0 = p_{\Theta_0} d\theta_0 p_{\Phi_0} d\Phi_0 \quad (4.15)$$

Le tirage de la direction d'émission étant un problème présentant une symétrie de révolution, l'angle ϕ_0 est tiré de façon uniforme sur son domaine $[0, 2\pi]$. Ceci permet de déduire les deux fonctions de densité de probabilité :

$$\begin{aligned} p_{\Theta_0} &= 2 \sin \theta_0 \cos \theta_0 \\ p_{\Phi_0} &= \frac{1}{2\pi} \end{aligned} \quad (4.16)$$

4.2.2. Distance inter-diffusion

Connaissant la direction de propagation de la particule, il reste à définir la distance qu'elle va parcourir avant sa première interaction. Soit σ_i la distance parcourue entre les positions x_i et x_{i+1} , cette longueur obéit à la loi d'atténuation exponentielle de Beer-Lambert(cf. 2.1.3). La probabilité pour que la particule se trouve en σ est alors $\exp(-k_s \sigma)$; la probabilité de diffuser entre σ et $\sigma + d\sigma$ quant à elle est proportionnelle à k_s . La probabilité d'une diffusion entre les abscisses σ et $\sigma + d\sigma$ est donc $k_s \exp(-k_s \sigma) d\sigma$, ce qui conduit à

$$p_{\Sigma}(\sigma_i) = k_s e^{-k_s \sigma_i} \quad (4.17)$$

où p_{Σ} est la densité de probabilité de la distance parcourue jusqu'à la prochaine diffusion (densité de probabilité du libre parcours).

4.2.3. Direction de diffusion

Si l'interaction définie a lieu dans le volume étudié (c'est à dire que la position n'est pas définie en dehors du domaine), il faut maintenant choisir une direction de diffusion au moment de l'interaction. Dans le cas général, une direction de propagation après

diffusion est sélectionnée en utilisant une fonction de phase normalisée $\Phi(u, u')$ définie à partir des données du milieu diffusant. Dans le cas simple de diffusions isotropes, la direction est choisie parmi une distribution homogène sur la sphère unité :

$$p_{\mathbf{u}_i}(\mathbf{u}_i) = \frac{1}{4\pi} \quad (4.18)$$

dont on déduit les deux fonctions :

$$\begin{aligned} p_{\Phi_i} &= \frac{1}{2\pi} \\ p_{\Theta_i} &= \frac{\sin \theta_i}{2} \end{aligned} \quad (4.19)$$

4.2.4. Test de sortie

La simulation d'une trajectoire se termine lorsque la direction \mathbf{u}_i et la longueur de propagation σ_i définissent une position \mathbf{x}_i hors de la couche. Une fonction test correspondante peut être écrite à l'aide de la fonction de Heaviside et de la coordonnée z_{i+1} du point d'interaction :

$$S(\mathbf{u}_i, \sigma_i, \mathbf{x}_i) = H(z_{i+1})H(e - z_{i+1}) \quad (4.20)$$

valant 0 en cas de sortie et 1 sinon. Pour raison de facilité d'écriture, on appellera $T(\mathbf{u}_i, \sigma_i, \mathbf{x}_i)$ la fonction ayant le comportement inverse (valant 1 si la position définie est une sortie). Ce choix se justifie pleinement lors de l'écriture de l'algorithme et de l'expression intégrale (cf. 4.3.2). Si une sortie a lieu, on peut aisément calculer la longueur σ_{si} entre le précédent point d'interaction et la frontière de sortie.

4.2.5. Algorithme analogue

Ce raisonnement aboutit à l'algorithme présenté dans la figure 4.2.

4.3. Approche intégrale

Dans le cadre de nos applications des méthodes de Monte-Carlo, toutes les grandeurs peuvent être exprimées à l'aide d'une intégrale. Il n'est cependant pas nécessaire d'exprimer cette intégrale formellement en vue d'une simulation, comme nous venons de le voir. Cependant cette forme intégrale est parfois nécessaire si l'on veut ensuite pouvoir effectuer des optimisations (principalement celles affectant l'expression de la fonction de poids et des fonctions de densité de probabilités) ou lorsque l'on souhaite étudier des sensibilités. Il convient de signaler qu'approche analogue et intégrale sont complémentaires et toutes deux nécessaires aux optimisations qui seront présentées ensuite : l'approche analogue se basant sur la physique du phénomène justifie l'écriture des fonctions de poids, l'approche intégrale mathématique autorise des manipulations et substitutions entre intégrales.

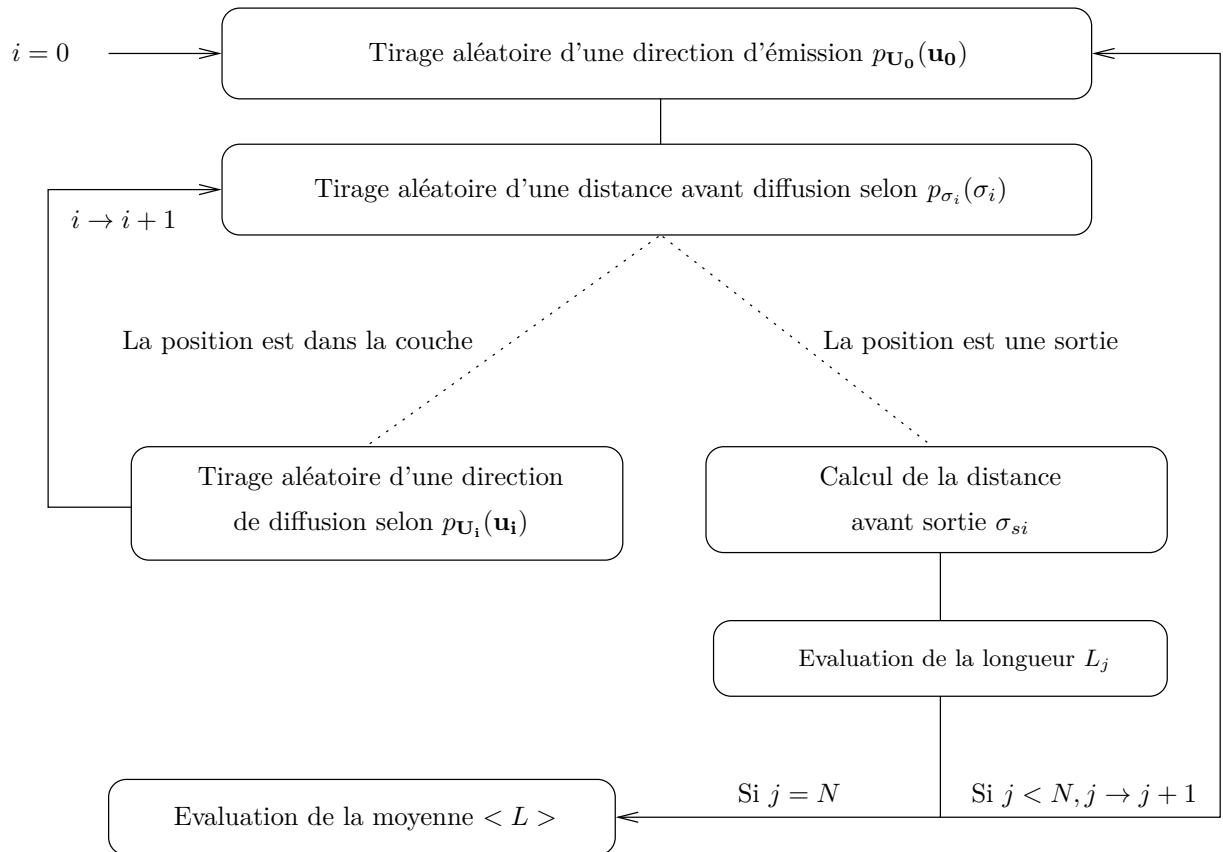


FIGURE 4.2.: Algorithme d'évaluation de la longueur moyenne d'un trajet de diffusion dans une couche mono-dimensionnelle par une méthode de Monte-Carlo analogue à N générations aléatoires.

Dans un premier temps et afin d'illustrer le principe, nous allons limiter notre propos à l'évaluation d'une intégrale à une dimension. L'extension sera faite ensuite très aisément aux intégrations multiples qui sont le véritable champ d'application des méthodes de Monte-Carlo : rien n'est perdu en clarté en exposant l'ensemble des concepts sur des exemples à une seule dimension.

4.3.1. Calcul intégral

Calcul d'une intégrale simple Soit une fonction f définie et continue sur un intervalle $[a, b]$, nous nous proposons de calculer la valeur de son intégrale sur l'ensemble de son domaine :

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (4.21)$$

Cette intégrale peut être réécrite sous la forme suivante où on fait apparaître la longueur de l'intervalle :

$$I = (b - a) \int_a^b \frac{f(x)}{b - a} dx \quad (4.22)$$

On définit une variable aléatoire X dont la fonction densité de probabilité est uniforme sur l'intervalle $[a, b]$. Elle a donc pour expression $\frac{1}{b-a}$ et l'évaluation de I peut s'interpréter comme le calcul, à la constante $b - a$ près, de l'espérance de la variable aléatoire $f(X)$:

$$I = (b - a)\mathbf{E}[f(X)] \quad (4.23)$$

On peut alors choisir d'estimer l'espérance en générant une suite de nombres aléatoires x_i répartis uniformément dans l'intervalle $[a, b]$ et en calculant la moyenne des valeurs $f(x_i)$ correspondantes.

Le formalisme plus général qui mène à la construction d'un estimateur de I à travers un calcul d'espérance nécessite l'usage du théorème limite central (cf. 4.1.2). Afin de généraliser, introduisons dans l'expression de l'intégrale I , une nouvelle fonction $p(x)$ définie et non nulle sur $[a, b]$ ayant les propriétés d'une fonction de densité de probabilité et soit X une variable aléatoire ayant cette densité de probabilité. On peut alors écrire

$$I = \int_a^b p(x) \frac{f(x)}{p(x)} dx \quad (4.24)$$

poser $g(x) = \frac{f(x)}{p(x)}$ et introduire la variable aléatoire $Y = g(X)$. On peut ainsi écrire I sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} I &= \int_D p(x)g(x)dx \\ &= \mathbf{E}[g(X)] = \mathbf{E}[Y] \end{aligned} \quad (4.25)$$

On appelle $g(x) = \frac{f(x)}{p(x)}$ la fonction de poids de Monte-Carlo. Une suite de réalisations indépendantes x_1, x_2, \dots, x_N de X permet d'écrire l'espérance de Y lorsque $N \rightarrow \infty$:

$$I = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \quad (4.26)$$

Comme il est impossible de faire une infinité de tirages, nous construisons un estimateur de I , pour un nombre fini de tirages de X :

$$I \approx \hat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad (4.27)$$

Il ne reste plus qu'à appliquer le théorème limite central sur cette dernière suite pour démontrer que \hat{I} tend vers une loi de Laplace-Gauss de valeur moyenne $\mathbf{E}[Y] = I$ et d'écart-type $\frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}}$. Notre estimateur \hat{I} tend bien vers I pour un nombre de réalisations infini et son incertitude diminue lorsque N augmente comme $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

On remarquera enfin que l'évaluation de l'écart-type est aussi une estimation :

$$\sigma(\hat{I}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\text{Var}(Y)} \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^2 - \hat{I}^2 \right]^{1/2} \quad (4.28)$$

où on utilise $\langle \rangle_N$ comme symbole d'une moyenne d'ensemble sur N réalisations.

Calcul d'une intégrale multiple Le principe énoncé peut aisément se généraliser à une intégrale à n dimension :

$$I_n = \int_D f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (4.29)$$

$$D = D_1 \times D_2 \times \dots \times D_n$$

Toute réalisation \mathbf{x} d'une variable aléatoire vectorielle \mathbf{X} de dimension n dans un domaine D peut se décomposer en n réalisations successives de variables aléatoires de dimension 1 définies chacune dans un domaine D_i partie de D . L'intégrale I_n se réécrit ainsi :

$$I_n = \int_{D_1} dx_1 \int_{D_2} dx_2 \dots \int_{D_n} dx_n f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (4.30)$$

En toute généralité, ces variables peuvent ne pas être indépendantes les une des autres. Nous utilisons la notation $p_{X_i}(x_i|x_1, \dots, x_{i-1})$ pour indiquer une fonction densité de probabilité de X_i connaissant les tirages des $i - 1$ variables précédentes.

$$I_n = \int_{D_1} p_{X_1}(x_1) d(x_1) \int_{D_2} p_{X_2}(x_2|x_1) dx_2 \dots \int_{D_n} p_{X_n}(x_n|x_1, \dots, x_{n-1}) dx_n \frac{f(x_1, \dots, x_n)}{\prod_{i=1}^n p_{X_i}(x_i|x_1, \dots, x_{i-1})} \quad (4.31)$$

On reconnaît ici la même forme d'intégrales que dans le cas mono-dimensionnel avec comme fonction de poids :

$$W_{I_n} = \frac{f(X_1, \dots, X_n)}{\prod_{i=1}^n p_{X_i}(X_i|X_1, \dots, X_{i-1})}$$

W_{I_n} est aussi une variable aléatoire, nous avons donc finalement :

$$I_n \approx \hat{I}_n = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N w_{I_n,k} \quad (4.32)$$

où les w_{I_n} sont N réalisations indépendantes de W_{I_n} .

On constate à partir de l'équation (4.28) qu'il est toujours possible de réduire l'incertitude sur l'évaluation faite par une méthode de Monte-Carlo en augmentant le nombre N de tirages. A condition d'avoir les moyens numériques nécessaires à des générations plus nombreuses (temps de calcul mais aussi échantillonnage correct des domaines de définition), la convergence est certaine quelque soit le type de problème étudié. On observe de plus que la précision sur \hat{I} dépend fortement de la fonction $g(x)$ utilisée et donc de fait de la fonction $p(x)$ introduite. On peut donc définir cette fonction de sorte à minorer l'écart-type pour notre évaluation de I et gagner en précision. Ce type d'optimisation est tout à fait comparable à l'utilisation d'un maillage variable dans le contexte des méthodes déterministes d'intégration.

4.3.2. De l'approche analogue à l'approche intégrale

Nous allons maintenant reprendre l'algorithme 4.2. La variable aléatoire L , longueur d'une trajectoire de diffusion multiple, est considérée comme une fonction d'une succession de variables aléatoires mono-dimensionnelles correspondant aux paramètres de la trajectoire : longueur inter-diffusion, angles de diffusion, ... Nous sommes donc bien dans le cadre de l'estimation d'une intégrale multiple. De façon à expliciter cette intégrale, on associe à chacune des générations aléatoires une intégrale sur le domaine de définition de sa fonction de densité de probabilité. La grandeur finale apparaît alors comme l'espérance de la fonction aléatoire L .

Nous allons reconstruire pas-à-pas la grandeur $E(L)$, longueur moyenne d'un parcours de multi-diffusion dans la couche. Prenons l'algorithme analogue et les différentes fonctions de densité de probabilités définies précédemment et explicitons la forme intégrale correspondante.

- La première génération aléatoire correspond au choix de la direction d'émission selon $p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) = \frac{\cos\theta_0}{\pi}$ dans l'ensemble des directions possibles dans le demi-hémisphère supérieur. La direction d'émission, grandeur vectorielle, se décompose elle-même en deux variables mono-dimensionnelles θ_0 et ϕ_0 . On obtient l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned} \langle L \rangle &= \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \dots \\ &= \int_0^{2\pi} p_{\Phi_0}(\phi_0) d\phi_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} p_{\theta_0}(\theta_0) d\theta_0 \dots \end{aligned} \quad (4.33)$$

- La seconde génération aléatoire est le choix d'une position d'interaction selon $p_{\Sigma}(\sigma) = k_s e^{-k_s \sigma}$ en gardant en mémoire que le coefficient de diffusion k_s est supposé constant dans la couche. Cette génération est effectuée sur l'ensemble des longueurs de diffusion possibles dans \mathbb{R}^+ . Cela revient à empiler cette intégrale dans l'expression de $\langle L \rangle$:

$$\langle L \rangle = \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_0}(\sigma_0) d\sigma_0 \dots \quad (4.34)$$

- Ensuite, un test est effectué sur la condition de sortie : Le point d'émission, la direction et la longueur d'interaction définissent-ils une position à l'intérieur ou à l'extérieur de la couche ? On effectue ce test grâce à la coordonnée z_1 du point \mathbf{x}_1 . Si elle est inférieure à 0 ou supérieure à l'épaisseur e de la couche, il y a sortie. Nous avons défini précédemment (cf. équation (4.20)) les fonctions $S(\mathbf{u}_i, \sigma_i, \mathbf{x}_i)$ et $T(\mathbf{u}_i, \sigma_i, \mathbf{x}_i)$ prenant respectivement la valeur 0 et 1 en cas de sortie. En cas de sortie, la longueur entre la position d'émission et la frontière de sortie σ_{s_0} est évaluée et la simulation pour cette trajectoire est terminée. Dans le cas contraire, la distance σ_0 est ajoutée à la longueur du parcours. Ces deux options donnent lieu à l'écriture intégrale suivante :

$$\langle L \rangle = \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_0}(\sigma_0) d\sigma_0 \left[T(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{x}_0) \sigma_{s_0} + S(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{x}_0) \left[\sigma_0 + \dots \right] \right] \quad (4.35)$$

- Si la position \mathbf{x}_1 est toujours dans la couche, alors il y a de nouveau diffusion. Une nouvelle direction est générée uniformément selon $p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) = \frac{1}{4\pi}$ ainsi qu'une nouvelle distance avant interaction selon $p_{\Sigma_1}(\sigma_1) = k_d e^{-k_d \sigma_1}$ sur \mathbb{R}^+ :

$$\begin{aligned} \langle L \rangle = & \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_0}(\sigma_0) d\sigma_0 \left[T(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{x}_0) \sigma_{s0} \right. \\ & \left. + S(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{x}_0) \left[\sigma_0 + \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left[\dots \right] \right] \right] \end{aligned} \quad (4.36)$$

On procède ainsi jusqu'à sortie de la particule. On peut donc généraliser la procédure et la grandeur $\langle L \rangle$ issue de l'algorithme s'exprime alors ainsi :

$$\begin{aligned} \langle L \rangle = & \int_{2\pi} p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_0}(\sigma_0) d\sigma_0 \left[T(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{x}_0) \sigma_{s0} + \right. \\ & S(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{x}_0) \left[\sigma_0 + \int_{4\pi} p_{\mathbf{u}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \left[T(\mathbf{u}_1, \sigma_1, \mathbf{x}_1) \sigma_{s1} + \right. \right. \\ & \left. \left. S(\mathbf{u}_1, \sigma_1, \mathbf{x}_1) \left[\sigma_1 + \dots \right] \right] \right] \end{aligned} \quad (4.37)$$

On peut remanier cette expression afin de faire apparaître la fonction poids $w(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{u}_1, \sigma_1, \dots)$:

$$\begin{aligned} \langle L \rangle = & \int_{2\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_0}(\sigma_0) d\sigma_0 \int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \int_0^{+\infty} p_{\Sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 \dots \\ & w(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{u}_1, \sigma_1, \dots) \end{aligned} \quad (4.38)$$

avec :

$$\begin{aligned} w(\mathbf{u}_0, \sigma_0, \mathbf{u}_1, \sigma_1, \dots) = & T(\mathbf{u}_0, \mathbf{x}_0) \sigma_{s0} + S(\mathbf{u}_0, \mathbf{x}_0) \left[\sigma_0 + \right. \\ & \left. T(\mathbf{u}_1, \mathbf{x}_1) \sigma_{s1} + S(\mathbf{u}_1, \mathbf{x}_1) \left[\sigma_1 + \dots \right] \right] \end{aligned} \quad (4.39)$$

Ce poids est l'expression générale de la longueur de la trajectoire à partir des réalisations décrites dans l'algorithme 4.2.

On constate le lien très fort entre les approches intégrale et analogue : il est possible de passer de l'une à l'autre très facilement et d'associer un algorithme à chaque intégrale. Cette dualité est l'origine d'une partie des optimisations possibles des méthodes de Monte-Carlo : On peut travailler sur l'expression intégrale d'une grandeur et influencer les qualités de convergence de l'algorithme équivalent. Nous allons présenter quelques unes de ces manipulations.

4.3.3. Optimisation des tirages et échantillonnage préférentiel

Nous avons remarqué précédemment qu'à des fins d'optimisation des méthodes de Monte-Carlo, il est possible dans la formulation intégrale de mettre en avant le rôle

de la fonction de densité de probabilité choisie pour effectuer les tirages. L'échantillonnage préférentiel consiste à modifier cette fonction afin de générer des variables aléatoires tendant à minimiser la variance finale. Pour ce faire, on remplace la fonction de densité de probabilité initiale $p(x)$ par une fonction plus appropriée $\tilde{p}(x)$. Cette substitution implique qu'on multiplie la fonction poids par le rapport $\frac{p(x)}{\tilde{p}(x)}$. Cette modification s'applique tout aussi bien à un algorithme analogue car l'expression complète de l'intégrale n'est pas nécessaire : La génération aléatoire et la contribution de chaque réalisation sont modifiées mais la structure de l'algorithme reste la même.

En poussant cette logique, lorsque la fonction intégrée ne change pas de signe, il existe une fonction densité de probabilité dite idéale. En effet le choix dans (4.24) de la fonction densité de probabilité

$$p_X(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x)dx} = \frac{f(x)}{I} \quad (4.40)$$

conduit à une variance nulle et à l'obtention du résultat en un seul et unique tirage. En pratique, cette solution requiert la connaissance de la valeur I qui est justement l'objectif du calcul, cela reste donc une situation idéale. Cependant une fonction de densité de probabilité se rapprochant de cette fonction idéale conservera un critère de convergence rapide. L'optimisation de la fonction de densité de probabilité du cas réel inspirée des formes des solutions analytiques obtenues dans les cas limites tire avantage de ce principe. Dans le cas du transfert radiatif, construire la fonction de densité de probabilité par pondération des fonctions de densité de probabilité idéales issues des cas optiquement forts et faibles est souvent une piste vers une convergence plus rapide [14].

4.4. Calculs de sensibilités par la méthode de Monte-Carlo

Nous présenterons ici un bref aperçu du calcul de sensibilité au sein des méthodes de Monte-Carlo. Le lecteur intéressé pourra se référer aux travaux de M. Roger pour de plus amples détails ainsi que des exemples de mises en application [45].

L'étude de sensibilités des variables d'un modèle aux paramètres en régissant l'évolution (et donc la simulation) est un type d'analyse très courant au sein du calcul scientifique et de l'analyse de phénomènes physiques. Elle consiste en une évaluation de l'influence des variations d'un paramètre sur le résultat final. Nous commençons donc par rappeler formellement la définition d'une sensibilité et l'expression en terme de perturbation.

Soit une grandeur vectorielle \mathbf{X} définie par la fonction \mathbf{f} :

$$\mathbf{X} = \mathbf{f}(\mathbf{b}, t) \quad (4.41)$$

Le Jacobien de la grandeur \mathbf{X} par le paramètre (vectoriel) \mathbf{b} définit une matrice dite de sensibilité d'expression générale :

$$J_{\mathbf{X}/\mathbf{b}} = \partial_{\mathbf{b}}\mathbf{f}(\mathbf{b}, t) \quad (4.42)$$

Classiquement dans une étude de sensibilité, on applique une variation $\delta\mathbf{b}$ très petite face à \mathbf{b} et on étudie le comportement de la grandeur \mathbf{X} résultante. On peut alors approximativement exprimer la grandeur perturbée à l'aide du Jacobien ainsi :

$$\widetilde{\mathbf{X}}_{\mathbf{b}+\delta\mathbf{b}} = \mathbf{X}_{\mathbf{b}} + J_{\mathbf{X}/\mathbf{b}}\delta\mathbf{b} \quad (4.43)$$

Cependant en général l'expression de la fonction \mathbf{f} n'est pas connue analytiquement : la grandeur \mathbf{X} n'est connue qu'à travers une évaluation numérique reposant sur l'usage de modèles et d'approximations plus ou moins fortes. Cette expression formelle est donc inutilisable dans la plupart des cas.

Dans le cadre des méthodes de Monte-Carlo, nous avons vu que toute grandeur peut être exprimée comme une intégrale d'une fonction des paramètres de la simulation :

$$I(\mathbf{b}, t) = \int_{D(\mathbf{b}, t)} f(\mathbf{x}, \mathbf{b}, t) d\mathbf{x} = \int_{D(\mathbf{b}, t)} w(\mathbf{x}, \mathbf{b}, t) p_X(\mathbf{x}, \mathbf{b}, t) d\mathbf{x} = \mathbf{E}(W) \quad (4.44)$$

On gardera en mémoire qu'ici l'intégrale ne représente pas uniquement la grandeur à calculer mais aussi le processus utilisé pour son calcul. Sa manipulation adéquate mène à une formulation différente mais ne change pas pour autant la grandeur finale évaluée.

Il convient dès à présent de différencier deux types de sensibilités :

- Des sensibilités à des paramètres n'influençant pas les bornes du domaine D d'intégration, qu'on appelle sensibilités paramétriques.
- Des sensibilités à des paramètres déformant le domaine d'intégration de la forme intégrale associé, que l'on nomme sensibilités à la déformation du domaine ou sensibilité au domaine.

Ces deux types de sensibilités mettent en jeu des concepts différents. On notera qu'il est parfois possible, par changement de formulation intégrale, de passer d'une sensibilité au domaine à une sensibilité paramétrique. Cette dernière est la plus simple à exprimer et celle que nous rencontrons dans notre étude, nous commencerons donc par sa présentation.

4.4.1. Sensibilités paramétriques

Soit la grandeur intégrale $I = \int_D f(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x}$ où, pour simplifier, b est maintenant scalaire. Nous avons vu que son évaluation par une méthode de Monte-Carlo revient à calculer l'espérance de la fonction aléatoire $W(X, b, t) = \frac{f(X, b, t)}{p_X(X, b, t)}$, fonction poids de Monte-Carlo. Ses réalisations sont construites à partir de réalisations \mathbf{x}_i de la variable aléatoire \mathbf{X} effectuées selon la fonction densité de probabilité $p_X(\mathbf{x}, b, t)$.

$$\begin{aligned} I(b, t) &= \int_D w(\mathbf{x}, b, t) p_X(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x} = \mathbf{E}(W) \\ &\approx \hat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w(\mathbf{x}_i, b, t) \end{aligned} \quad (4.45)$$

Dès lors que le domaine D indépendant du paramètre b , l'expression de la sensibilité de I au paramètre b est la suivante :

$$\partial_b I = \partial_b \int_D f(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x} = \int_D \partial_b f(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x} \quad (4.46)$$

On observe que la grandeur I et sa sensibilité $\partial_b I$ ont le même domaine d'intégration, ce qui correspond dans un algorithme de Monte-Carlo à la même succession de générations aléatoires. On souhaite calculer en parallèle de l'évaluation de I la valeur de sa sensibilité à b , c'est à dire utiliser le jeu de tirages aléatoires issus de l'évaluation de I afin d'évaluer $\partial_b I$. Ceci revient à imposer que les fonctions densité de probabilité soient identiques dans les deux cas. L'expression de la sensibilité est alors la suivante :

$$\partial_b I = \int_D p_X(\mathbf{x}, b, t) \frac{\partial_b f(\mathbf{x}, b, t)}{p_X(\mathbf{x}, b, t)} d\mathbf{x} = \int_D p_X(\mathbf{x}, b, t) w_b(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x} \quad (4.47)$$

où $w_b(\mathbf{x}, b, t)$ est la fonction poids de Monte-Carlo correspondant au calcul de la sensibilité de I au paramètre b . On peut relier l'expression de w_b à w , poids de Monte-Carlo de la grandeur I par la relation suivante [13] :

$$w_b = \partial_b w + w \frac{\partial_b p_X}{p_X} \quad (4.48)$$

Il est maintenant possible de construire un estimateur de cette sensibilité dont l'expression est :

$$\partial_b I \approx \widehat{\partial_b I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_b(\mathbf{x}_i, b, t) \quad (4.49)$$

Ainsi si l'algorithme de calcul de la grandeur I est déjà en place, on peut accéder simplement à sa sensibilité au paramètre b simultanément : Le fait que les mêmes fonctions de densité de probabilités apparaissent dans les expressions intégrales implique que les réalisations $w(\mathbf{x}_i)$ et $w_b(\mathbf{x}_i)$ soient faites à partir des mêmes séries de réalisation $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1, N}$.

Il faut pourtant garder en mémoire que la convergence de l'algorithme correspondant à l'évaluation de la grandeur I n'implique pas obligatoirement une même qualité de convergence pour sa sensibilité $\partial_b I$. En effet le choix des fonctions de densité de probabilité affectées au calcul de $f(\mathbf{x}, b, t)$ n'est peut être pas aussi judicieux une fois appliqué au calcul de $\partial_b f(\mathbf{x}, b, t)$. Dans les applications que nous avons traité jusqu'ici, la convergence sur la sensibilité a été satisfaisante ou n'a nécessité qu'un seul ordre de grandeur supplémentaire dans le nombre N de générations. Une attention particulière doit être portée à cette qualité de convergence et mise en relation avec le gain de temps que procure l'évaluation simultanée.

4.4.2. Sensibilités au domaine

La sensibilité au domaine est l'estimation de l'influence d'un paramètre influant sur les bornes de l'intégrale. Nous choisissons ici de nous limiter à une présentation des

bases de ce type d'estimation.

Le principe d'estimation des sensibilités au domaine à l'aide des méthodes de Monte-Carlo est à proprement parlé le même que dans le cas d'une sensibilité paramétrique. Quelques hypothèses sont nécessaires au formalisme d'écriture de ce type de sensibilités :

- Au voisinage de la valeur du paramètre, l'expression du domaine d'intégration D selon le paramètre de sensibilité b est dérivable et préserve sa topologie.
- La frontière ∂D du domaine est régulière par morceau.

Si ces conditions sont respectées, alors l'expression de la dérivée de I par rapport au paramètre b s'écrit [45] :

$$\partial_b I = \int_D \partial_b f(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x} + \int_{\partial D} f(\mathbf{y}, b, t) \mathbf{V}_b(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4.50)$$

où $\mathbf{n}(\mathbf{y})$ est le vecteur normal sortant au point \mathbf{y} de la frontière ∂D . $\mathbf{V}_b(\mathbf{y})$ est un champs vectoriel à la frontière ∂D représentant la déformation de cette frontière en fonction de la perturbation du paramètre b . Une seule et unique contrainte est imposée sur ce champs vectoriel : Soit $g(\mathbf{x}, b, t)$ une fonction permettant de décrire le domaine $D(b, t)$ dans \mathbb{R}^n . Elle vérifie la propriété

$$D(b, t) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n | g(\mathbf{x}, b, t) < 0\} \quad (4.51)$$

Cette fonction g doit être C_1 en b afin de satisfaire le critère de dérivabilité requis sur D . La frontière ∂D est quant à elle décrite par l'égalité $g(\mathbf{x}, b, t) = 0$. Pour tout \mathbf{y} à la frontière, la vitesse $\mathbf{V}_b(\mathbf{y})$ doit vérifier :

$$\frac{d}{du} g(\mathbf{x} + u \mathbf{V}_b(\mathbf{y}), b + u, t) |_{u=0} = 0 \quad (4.52)$$

où u décrit la variation du paramètre b , \mathbf{V}_b traduisant l'effet de cette variation sur \mathbf{y} . Par sa similitude aux équations de transport, cette dernière équation justifie le nom donné au champs \mathbf{V}_b : vitesse de déformation du domaine.

Dans la formulation des sensibilités paramétriques, nous avons mis en avant la possibilité d'évaluation simultanée de la grandeur et de sa sensibilité par l'usage des mêmes réalisations aléatoires $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1, N}$. Afin que cette propriété soit conservée dans le cas de sensibilités au domaine, il faut que le domaine d'intégration de la sensibilité soit identique à celui de la grandeur. L'utilisation directe de l'équation (4.50) ne met pas en avant cette possibilité mais si nous utilisons le théorème de Gauss-Green-Ostrogradski pour remplacer l'intégrale sur ∂D par une intégrale sur D , alors les conditions d'application sont réunies. L'application de ce théorème à (4.50) donne :

$$\partial_b I = \int_D \left[\partial_b f(\mathbf{x}, b, t) + \nabla \cdot (f(\mathbf{x}) \mathbf{V}_b(\mathbf{x})) \right] d\mathbf{x} \quad (4.53)$$

où $\nabla \cdot$ est l'opérateur divergence de dimension identique à celle de D .

L'application de cette formule dans l'algorithme de Monte-Carlo implique l'extension

de la vitesse de déformation (jusqu'alors seulement définie à la frontière) à tout le domaine. Il faut donc construire un champs \mathbf{V}_b dans D , respectant la condition (4.52) à la frontière. Aucune condition n'est imposée dans $D - \partial D$, la définition de la vitesse de déformation jouit donc d'une liberté mathématique quasi-totale.

L'estimation de $\partial_b I$ avec prise en compte de la déformation du domaine peut donc suivre la démarche décrite précédemment. Si $p_X(\mathbf{x}, b, t)$ est la fonction densité de probabilité et $w(\mathbf{x}, b, t)$ le poids de Monte-Carlo utilisés dans l'estimation de I , on obtient concernant $\partial_b I$:

$$\partial_b I = \int_D p_X(\mathbf{x}, b, t) w_b(\mathbf{x}, b, t) d\mathbf{x} \quad (4.54)$$

où $w_b(\mathbf{x}, b, t)$ est le poids de Monte-Carlo associé au calcul de la sensibilité. D'après ce que nous venons de dire et l'égalité (4.48), son expression est :

$$w_b = \partial_b w + w \frac{\partial_b p_X}{p_X} + \frac{\nabla \cdot (w p_X \mathbf{V}_b)}{p_X} \quad (4.55)$$

On remarque que cette expression ne diffère de la formulation paramétrique (4.48) que par l'addition du terme $\frac{\nabla \cdot (w p_X \mathbf{V}_b)}{p_X}$. Nous avons vu jusqu'à maintenant que l'erreur statistique (variance) est fonction du nombre N de réalisations et de la fonction densité de probabilité p_X . Nous avons aussi relevé le fait que le choix de fonctions densité de probabilité dans l'évaluation de la grandeur I n'est peut-être pas toujours adapté à celui de l'évaluation d'une sensibilité paramétrique $\partial_b I$. Dans le cas d'une sensibilité au domaine et compte tenu des grandes libertés sur le choix de \mathbf{V}_b , l'optimisation du calcul est parfois simplifiée par un choix élégant de champs de vitesse. Une démarche complète est détaillée dans [45].

4.5. Géométries complexes et synthèse d'image

L'objectif premier de la synthèse d'image est la conception d'images d'un grand réalisme sous contrainte des moyens numériques disponibles lors de la mise en oeuvre. L'atteinte de cet objectif répond à des critères qualitatifs prenant en compte des outils tels que la perception de l'oeil humain. Il est au premier abord malaisé de voir le lien unissant le monde de la synthèse d'image à celui de la simulation des transferts radiatifs. Cependant la volonté d'obtenir des images de plus en plus réalistes a poussé cette discipline à porter son attention sur la résolution de l'équation de transfert radiatif. Ainsi des techniques de résolution de l'ETR basées sur une approche similaire à l'approche analogue décrite précédemment sont mises en oeuvre ; on parle dans ce domaine de résolution de l'équation de rendu (*rendering equation*).

Un artifice visuel comme l'utilisation d'un flou peut permettre un rendu "réaliste" dans un film mais être mis en défaut sur une image fixe. Dans de nombreux cas, la qualité de rendu d'images dynamiques est fonction du temps de calcul consacré. Les avancées récentes en réalité virtuelle nécessitent une prise en compte et un traitement de l'évolution d'une scène à la variation d'un paramètre (nouvelle source lumineuse,

disparition d'un obstacle) sans devoir recalculer l'intégralité du problème. Toutes ces demandes sont très proches des attentes et développements actuels en simulation des transferts radiatifs : Résolution complète de l'ETR, simulation rapide de diagnostique et calcul de sensibilités respectivement.

La réciproque est cependant aussi valable : Face à la complexité grandissante des problèmes rencontrés en simulation et la volonté de décrire dans son intégralité des scènes complexes (fours de combustions, milieux poreux, tissus biologiques), le domaine de la simulation des transferts radiatifs s'emploie à adapter les outils mis à disposition par la synthèse d'images [40].

Nous allons dans cette partie présenter deux de ces outils pouvant facilement être mis à profit en simulation des transferts radiatifs : la notion de voxel et les procédures d'accélération dans le cadre du calcul d'intersections. Nous présenterons ensuite le programme de synthèse d'image utilisé dans le cadre de ces travaux.

4.5.1. Outils de synthèse d'image utilisés pour la simulation des transferts radiatifs

Les méthodes numériques en synthèse d'image dans le cadre de la résolution de l'ETR utilisent de plus en plus communément des simulations par méthodes de Monte-Carlo pour décrire le transport de la lumière [50]. La description générale de ces approches est similaire à celle de l'approche analogue de la simulation par MMC décrite précédemment : Des rayons de lumières sont envoyés à travers les pixels formant l'image, ils sont suivis lors de leur propagation parmi les objets de la scène jusqu'à une source lumineuse et la couleur du pixel dont ils sont issus est ensuite déduite de l'énergie portée sur le trajet optique ainsi défini. Cette description dite directe¹ dans le domaine de la synthèse d'images paraît être indirecte du point de vue radiatif : Le point de départ n'est pas la source lumineuse mais le pixel d'observation et la contribution de l'environnement extérieur semble ignorée. De fait deux modèles se détachent dans l'estimation de la propagation entre les sources lumineuses et les pixels d'observation :

- Les modèles locaux, très simples, qui ne considèrent que le trajet direct entre les sources et la cible (les pixels de l'écran) [42]. Ces modèles ne prenant pas en compte les contributions de réflexions et de transmissions par les objets de la scène ont été étendues avec, entre autres, l'utilisation de fonction locale d'illumination (*Bidirectional Reflectance Distribution Function*) permettant de prendre en compte un plus grand nombre de phénomènes [21, 10]. Ces modèles quoique visuellement satisfaisants n'ont pas une rigueur physique suffisante pour être utilisés dans le cadre de la simulation des transferts radiatifs.
- Les modèles globaux, pour lesquels le rayonnement calculé en un point est pleinement fonction du rayonnement réfléchi venant du reste de la scène. Les formes de ce modèle les plus utilisées sont inspirées du modèle de Kajiya [25] qui s'ins-

1. Nous avons en fait décrit à titre d'exemple un cas spécifique nommé le calcul d'illumination globale par lancé de rayon, introduit plus bas.

pire lui-même de l'ETR. A ce titre, l'ouvrage de Siegel et Howell [48] est cité (à l'époque, l'édition de 1981) comme référence, montrant le lien unissant les deux domaines. Ce type de modèle est évidemment bien plus proche des préoccupations rencontrés dans le domaine des transferts radiatifs. Nous citerons en particulier le calcul de l'illumination globale par lancé de rayons [53] décrit en introduction de cette partie ainsi que le calcul de l'illumination globale par la méthode de Monte-Carlo, identique dans sa formulation mais pour lequel les chemins lumineux de la scène sont échantillonnés aléatoirement. Une étude complète du lancer de rayon est proposée par Glassner [19].

Pour nos travaux, nous avons opté pour l'utilisation du calcul de l'illumination globale par la méthode de Monte-Carlo, pour sa formulation très liée aux images physiques et aux formulations des transferts thermiques. Ce choix est hérité des travaux de Pérez P. dans le cadre de l'utilisation de la synthèse d'image pour la simulation des transferts radiatifs [40].

La création d'une image de synthèse réaliste passe avant tout par l'évaluation des interactions rencontrées dans la scène par le faisceau de lumière. Il faut pouvoir déterminer l'éclairement de tout point de la scène afin de faire remonter l'information finale en termes de variations de couleur à l'écran. Nous sommes donc confrontés au problème du calcul des diffusions successives des photons constituant le rayon lumineux dans la scène. Cette reconstruction récursive est à mettre en parallèle avec l'intégrale de dimension infinie apparaissant dans la définition de la part diffuse de la luminance (cf. chapitre 2).

Une scène comprend très souvent un grand nombre d'objets, eux-mêmes pouvant être décrits par un grand nombre de formes géométriques. Dans la plupart des cas, ces formes sont souvent des agencements de triangles épousant la forme de la surface de l'objet. Le suivi des diffusions parmi ces objets pose alors le problème du calcul d'intersections entre le rayon lumineux et la multitude de triangles formant la scène. Nous allons aborder maintenant deux concepts de la synthèse d'image utilisés pour alléger ce problème et pouvant être directement utilisés en simulation des transferts radiatifs : La notion de voxel, qui sera étendue aux besoins spécifiques du transfert radiatif et les techniques d'optimisation du calcul d'intersections.

4.5.2. Notion de voxel

Formellement, le voxel est l'extension en trois dimensions du pixel, structure à deux dimensions symbolisant la plus petite unité descriptive des surfaces d'affichages. Le voxel est donc le plus petit élément de volume dans le découpage de la scène.

En synthèse d'image, dans le voxel est stocké l'ensemble des objets géométriques englobé dans le volume du voxel. Dans le cadre de la simulation des transferts radiatifs, nous adjoignons à cette description purement géométrique des informations spatiales essentielles tels que les profils de températures ou la concentration des espèces.

Cette qualification du voxel a un sens supplémentaire dès lors que l'on s'applique à écrire un code de simulation : le voxel devient l'entité fondamentale à manipuler, contenant toute l'information nécessaire aux calculs de la simulation.

4.5.3. Techniques d'accélération

Les techniques d'accélération du calcul de l'illumination globale par lancé de rayon ont pour objectif de réduire le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'un niveau de précision donné. Elles se divisent en deux catégories : La réduction du nombre de rayons nécessaires à cette précision ou la réduction du coût imputé aux calculs d'intersections. La première catégorie ne sera pas présentée car très proche de notions précédemment introduites comme l'optimisation de fonction de densité de probabilité (cf. 4.3.3) ou l'utilisation du calcul de sensibilité (cf. 4.4). La réduction du coût du calcul d'intersections passe par une hiérarchisation des objets de la scène réduisant au maximum le nombre de tests à effectuer. Classés par voisinage, les objets proches du point d'émission seront testés en premier lieu, pour finir par les objets les plus éloignés si aucune intersection n'est identifiée avant. On réalise ainsi une économie de temps de calcul en stoppant le suivi de rayon plus tôt, dès qu'une intersection est détectée.

Volumes englobants Dans le cas d'une description de surface par des triangles, si un objet de la scène est composé d'un grand nombre de facettes (par exemple le brûleur d'une chambre de combustion), l'évaluation de son intersection est très coûteuse car le rayon doit être confronté à chacun des triangles. Si on identifie la région de l'espace occupé par cet objet, on peut tester en premier lieu si le rayon pénètre effectivement cette région. Si ce n'est pas le cas, on économise autant de test d'intersections que de triangles formant l'objet.

Le moyen le plus simple pour délimiter une région de l'espace autour d'un objet est de délimiter une forme géométrique simple l'englobant dans sa totalité. Le cube est très souvent utilisé dans ce cas, car on peut choisir d'aligner ses faces aux trois axes de l'espace physique et ainsi trivialisier le test d'intersection avec le volume englobant, cependant d'autres formes sont aussi utilisées, comme la sphère ou le cylindre [47].

La logique peut être poussée un cran plus loin en définissant une hiérarchie de volumes englobants imbriqués qui seront testés successivement, réduisant encore les tests sur les facettes. Cependant, pour que cette méthode soit efficace, il faut que le volume englobant respecte grossièrement la forme de l'objet englobé. Or le choix de volume répondant aux critères de simplicité d'intersection est limité si l'on désire que le test sur le volume englobant ne soit pas aussi coûteux que sur la forme englobée. Inversement, si le volume englobant est très mal adapté, un grand nombre de rayons interceptant le volume englobant n'ont aucune chance de rencontrer l'objet.

Grille de subdivision Plutôt que de raisonner en partition de l'espace en respect des objets constituant la scène, une alternative est de partitionner arbitrairement l'espace et ensuite d'y affecter les parties des objets contenus dans les volumes ainsi définis. On parle alors de partition de l'espace. La plus simple de ces partitions est de définir un cube englobant toute la scène et d'y associer un maillage régulier. Les objets sont ensuite affectés aux sous-domaines les recouvrant tout ou en partie. Le suivi du rayon lumineux se fait de volume en volume et chaque objet associé au volume en cours est testé avant de propager le rayon au volume suivant dans le cas où aucune intersection

n'est identifiée. Ce maillage n'est cependant pas optimal :

- Si la distribution des objets est très disparate, de nombreux sous-domaines seront vides et des tests d'intersections pour entrer dans ces sous-domaines seront ajoutés inutilement ;
- Inversement, si les objets sont concentrés en plusieurs amas, ils seront probablement tous inclus dans un tout petit nombre de sous-domaines et un très grand nombre de tests d'intersections seront effectués dès l'entrée dans ces voxel.

BSP : Binary Space Partitioning Pour adapter la taille et la distribution des divisions de l'espace, une subdivision récursive adaptée à la complexité locale est utilisée. La construction d'une grille régulière est remplacée par un algorithme de division de l'espace en deux parties distribuant équitablement les objets de part et d'autre du plan de division. Les divisions sont effectuées successivement jusqu'à ce que plus aucun objet de la scène ne soit disponible ou qu'un niveau de profondeur spécifique de la grille ne soit atteint.

Les méthodes BSP sont organisées en grandes catégories en fonction du choix de la méthode de division. Dans le cas d'une division en deux selon chaque axe, on parle d'*octree* (l'espace est divisé en huit sous-volume). Si le nombre de sous-domaine défini sur chaque axe de division est plus grand que deux, on parle alors de *n-tree*. La structure de *kd-tree* est une hiérarchie basée sur la profondeur de subdivision et forme une catégorie à part mais regroupant les *octree*. Enfin, si les subdivisions ne sont pas régulières et définies par un plan non aligné sur les axes, on parle de *BSP-tree*.

5D Afin de limiter les test d'intersections aux objets de la scène se trouvant sur la trajectoire du rayon lumineux, Arvo et Kirk [1] proposent d'utiliser la notion d'angle solide. Des hyper-cubes à cinq dimensions sont définis comprenant les objets candidats à une intersection pour une partie de l'espace dans un angle solide donné. On constate ici la volonté de traiter le transfert radiatif dans toute sa complexité par l'usage d'une description mésoscopique.

4.5.4. PBRT

Les techniques d'accélération, leur mise en oeuvre sur une scène quelconque et les algorithmes d'intersections font l'objet d'implémentations dans des codes de synthèse d'images aux finalités multiples. Les techniques classiques font l'objet d'un savoir faire avéré dans la communauté de la synthèse d'image. Plutôt que de reprendre depuis le début ces notions et de les reformuler dans le cadre de la simulation des transferts radiatifs, nous avons pris le parti de profiter d'un code préexistant facilement adaptable à nos besoins. Nous avons pour ce faire sélectionné le code *Physically Based Rendering Techniques* [41]. Ce code est constitué d'une bibliothèque d'objets programmés en C++, dont la structure actuelle hérite du savoir-faire et des réflexions menées par les chercheurs en informatique durant ces vingt dernières années. Les classes d'objets constituant la bibliothèque ont été conçues de manière optimale et reflètent l'état ac-

tuel des réflexions menées jusque là pour la définition de ces objets. Il est intéressant de profiter de l'existence de ces outils pour étendre cette approche au calcul des transferts radiatifs avec la prise en compte de la complexité spectrale des gaz participants ou des phénomènes de diffusion multiple. Dans PBRT, les techniques d'accélération de suivi de rayons ainsi que les techniques de subdivision de grilles pour la voxelisation sont les techniques standards utilisées en synthèse d'image. Ce code, produit de plusieurs années de travail et qui a donné lieu à de nombreuses validations, représente pour nous un excellent outil de développement. Richement documenté et structuré selon une logique orienté objet définissant chaque fonctionnalité par un objet, nous avons pu aisément inclure la partie algorithmique concernant les calculs de transfert radiatif basés sur la MMC en faisant usage des notions d'héritage.

L'implémentation de nos algorithmes n'est pas décrite dans ce manuscrit, cependant leur validation pour le traitement des problèmes de premier retour fait l'objet de la partie suivante.

4.6. Problèmes de premier retour traités par la MMC

Jusqu'à maintenant dans ce manuscrit, la méthode de Monte-Carlo a été présentée dans le cadre de la résolution de l'équation de transfert radiatif (ETR) et les formulations algorithmiques associées ont été décrites. Enfin les liens et les apports du domaine de la synthèse d'images dans le cadre de ces simulations ont été mis en valeur. Nous allons maintenant présenter quelques exemples de mise en oeuvre concernant la simulation de trajectoires de premier retour. Le temps de développement consacré à l'adaptation des techniques de synthèse d'images est motivé par la poursuite des travaux à l'issue de cette thèse : La prochaine étape ne sera abordable que si nous disposons des moyens nécessaires à la simulation de géométries réalistes du point de vue des applications médicales. Néanmoins, au stade actuel, les seuls résultats de simulation que nous présenterons, en relation avec des développements théoriques appuyés sur l'approximation de diffusion, concernent des configurations académiques simples : essentiellement des configurations de type slab (diffusion 3D dans une géométrie 1D) et de type cube (diffusion 3D dans une géométrie 3D). En phase de développement, nous avons simulé diverses configurations géométriques complexes de façon à vérifier que nous ne rencontrons pas de difficultés techniques particulières et confirmer que les techniques de la synthèse d'image permettent bien d'aborder efficacement des géométries aussi complexes que celles illustrées dans la thèse de Patrice Pérez [40]. Nous ne reportons pas ici ces exemples qui n'apportent rien par rapport au travail de Patrice Pérez et nous nous concentrons sur des résultats de simulation donnant lieu, dans les chapitres suivants, à une analyse théorique aboutie de la statistique des chemins de premier retour.

L'algorithme implémenté dans le code PBRT et mis en pratique dans les exemples suivants est l'algorithme analogue de diffusion décrit dans le graphe 4.2. Comme mis en évidence dans [4] et explicité dans le chapitre 3, pour un éclairage uniforme et isotrope à la frontière, le premier moment de la longueur des chemins de premier retour

dans tout type de géométrie est un invariant statistique, indépendant de l'épaisseur optique de diffusion. La reproduction de ce résultat par une méthode de Monte-Carlo analogue est un premier test de mise en oeuvre. L'obtention des autres moments est également testée dans le but de définir les nombres de Knudsen abordables par cette méthode.

4.6.1. Diffusion 3D dans une géométrie 1D symétrique : le slab

Le cas d'une couche mono-dimensionnelle infinie est tout d'abord abordé, ne serait-ce que de façon à reproduire les résultats annoncés dans [5]. Ce type de géométrie allie une physique de diffusion en trois dimensions à une géométrie dont la description est aisée : la frontière est seulement constituée de deux plans parallèles.

Les résultats des évaluations des trois premiers moments de la longueur des chemins de premiers retours sont représentés dans le graphe 4.3 et dans la table 4.1. La valeur de l'invariant statistique y est aussi représenté. On constate que la simulation par la méthode de Monte-Carlo permet de calculer ces grandeurs avec une grande précision : Les écart-types σ des résultats donnés sont compris entre 10^{-3} (pour $\langle L \rangle$) et 10^{-1} (pour $\langle L^3 \rangle$ avec $1/Kn = 25$). Si on considère leurs valeurs relatives par rapport aux valeurs moyennes auxquels ils sont affectés, ces écart-types sont tellement minces qu'ils sont invisibles aux échelles représentées dans 4.3.

$1/Kn$	$\langle L \rangle$	$\sigma_{\langle L \rangle}$	$\langle L^2 \rangle$	$\sigma_{\langle L^2 \rangle}$	$\langle L^3 \rangle$	$\sigma_{\langle L^3 \rangle}$
1	1.99802	0.00154101	6.379	0.003893	30.0086	0.037923
2	2.00067	0.00172987	6.98192	0.004353	35.3776	0.043687
22.5	1.99779	0.00476949	26.848	0.004269	614.3556	0.182906
25	1.99169	0.00501638	29.34922	0.004913	737.6422	0.231254

TABLE 4.1.: Extraits des résultats illustrés dans le graphe 4.3.

Ces résultats montrent que l'usage de la simulation par la méthode de Monte-Carlo peut être envisagé pour la production de solutions de référence dans le cadre de notre étude : Au vu des écart-types obtenus, la plage d'épaisseur optique de diffusion $1/Kn$ utilisée ne semble pas poser de problème de précision numérique. Cependant, nous verrons par la suite dans le chapitre 5 que même si la précision est remarquable sur le calcul des moments en eux-mêmes, les calculs utilisant ensuite ces données pour déterminer les paramètres des modèles simplifiés proposés aboutissent à des résultats dont les écart-types deviennent rapidement importants. De plus, si l'on augmente la puissance de L au delà de 3 et si l'on augmente les valeurs de $1/Kn$ jusqu'à 100 ou 1000, les problèmes de convergence rencontrés deviennent inextricables.

Nous avons également reproduit l'ensemble des résultats présentés dans [5], notamment les calculs de la sensibilité de $\langle L^2 \rangle$ au coefficient de diffusion. Nous retrouvons

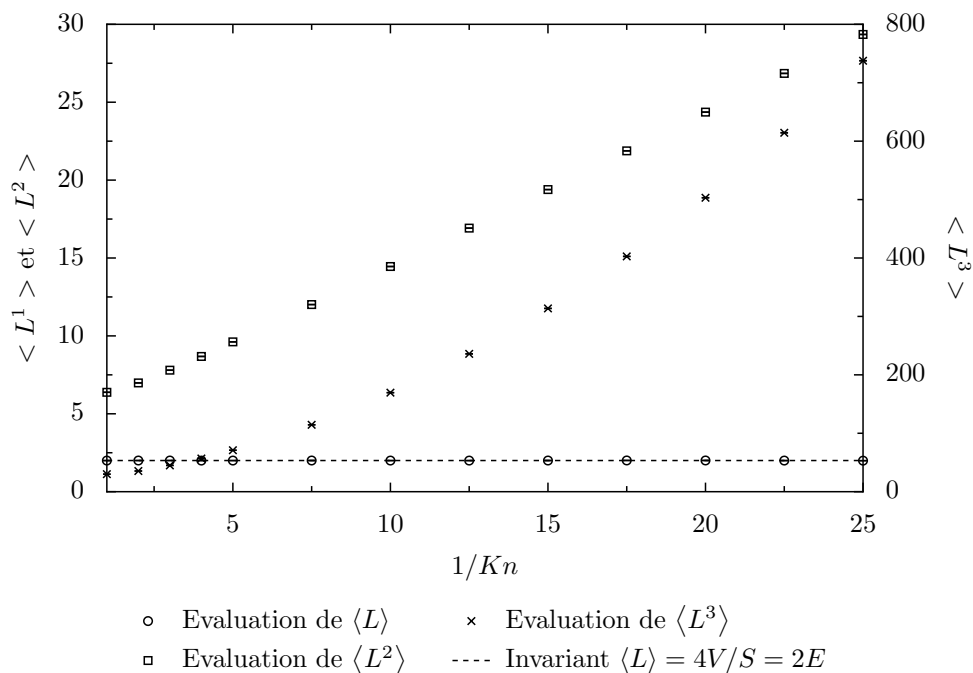


FIGURE 4.3.: Évaluation des moments d'ordre 1, 2 et 3 de la longueur des chemins de premier retour dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo, pour une fonction de phase isotrope. Les résultats ont été obtenus avec 10^6 tirages pour le moments d'ordre 1, 10^7 pour les moments d'ordre 2 et 3 aux épaisseurs optiques inférieure à 5 et 10^9 au dessus. Les barres d'erreurs sont représentées mais invisible à cette échelle.

les mêmes résultats, notamment le très bon accord entre cette sensibilité et le coefficient α_2 défini au chapitre précédent. Nous pouvons néanmoins faire dès maintenant une observation essentielle pour la suite : Dans la figure 4.4, nous comparons la solution de $\langle L^2 \rangle$ obtenue par la méthode de Monte-Carlo (que nous pouvons retenir comme référence) et la solution approchée correspondant au résultat de [5] à la limite des faibles K_n , soit ² $\langle L^2 \rangle \approx \alpha_2 k_s$. Nous pouvons observer qu'effectivement, comme annoncé dans [5], la pente est très bien captée par le coefficient α_2 sur toute la plage de K_n explorée, mais on note un décalage important, quasi constant, qui se traduit par des erreurs relatives élevées dès que l'on s'écarte de la limite $K_n = 0$ (ou $1/K_n = +\infty$). Inversement lorsque K_n augmente, l'écart reste constant et l'erreur relative tend donc vers 0. On voit donc qu'un travail reste à fournir pour améliorer la précision du modèle pour les K_n intermédiaires. La figure 4.5 conduit à des observations comparables sur le moment d'ordre 3.

2. Le coefficient k^* , inverse du libre parcours moyen de transport utilisé dans [5], se réduit au coefficient de diffusion k_s dans le cas pris en compte ici de diffusion isotrope.

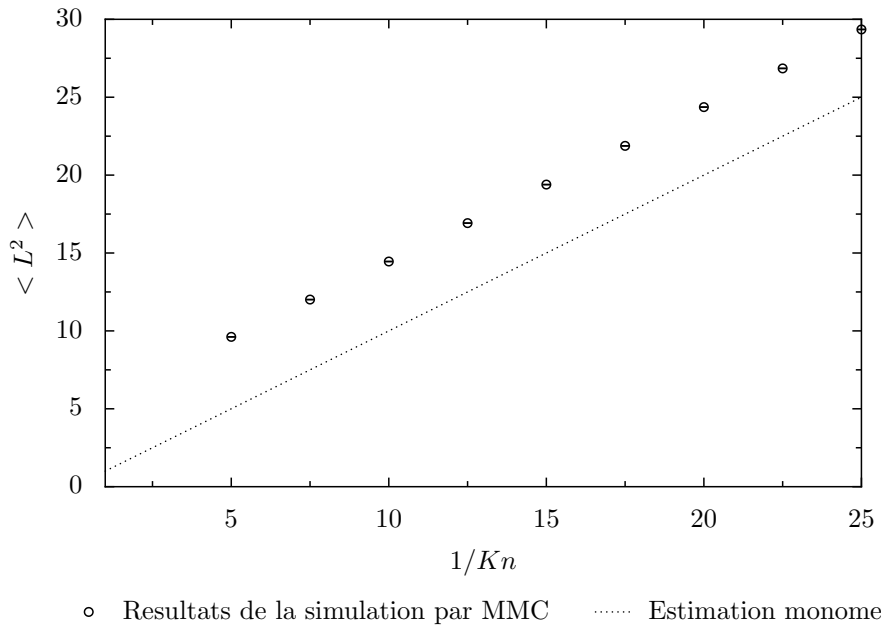


FIGURE 4.4.: Calcul de $\langle L^2 \rangle$ par la méthode de Monte-Carlo et comparaison avec la prédiction du modèle de [5], c'est à dire $\alpha_2 k_s$ où k_s est le coefficient de diffusion.

4.6.2. Diffusion 3D dans une géométrie 3D symétrique : le cube

Disposant d'un outil capable de traiter des géométries tridimensionnelles, nous avons vérifié que les conclusions précédentes obtenues sur le slab n'étaient pas spécifiques de cette géométrie particulière. On retrouve bien sûr l'invariance de $\langle L \rangle$ sur toute géométrie, mais on observe également les mêmes types de dépendance à K_n pour $\langle L^2 \rangle$ et $\langle L^3 \rangle$. Nous reportons dans la figure 4.6 et dans la table 4.2 les résultats obtenus pour le cube car nous les commenterons en détail dans le dernier chapitre. Nous obtenons des niveaux de précision équivalents à ceux de la couche

$1/Kn$	$\langle L \rangle$	$\sigma_{\langle L \rangle}$	$\langle L^2 \rangle$	$\sigma_{\langle L^2 \rangle}$	$\langle L^3 \rangle$	$\sigma_{\langle L^3 \rangle}$
5	0.665738	0.000740713	0.993888	7.88602e-05	2.30654	0.000356746
10	0.664881	0.000970264	1.39335	0.000155725	5.122	0.00113514
25	0.668787	0.0014704	2.59847	0.000466583	20.2878	0.00727122
30	0.667385	0.00159857	3.00046	0.000592267	27.5782	0.0108438

TABLE 4.2.: Extraits des résultats illustrés dans le graphe 4.6.

mono-dimensionnelle infinie et les résultats sont qualitativement très comparables. Nous ne pouvons par contre pas discuter de la prédiction correspondant à la proposition de [5] car les expressions de α_2 et α_3 ne sont pas aussi facilement accessibles analytiquement que pour le slab. Nous avons cependant mise en oeuvre le même cal-

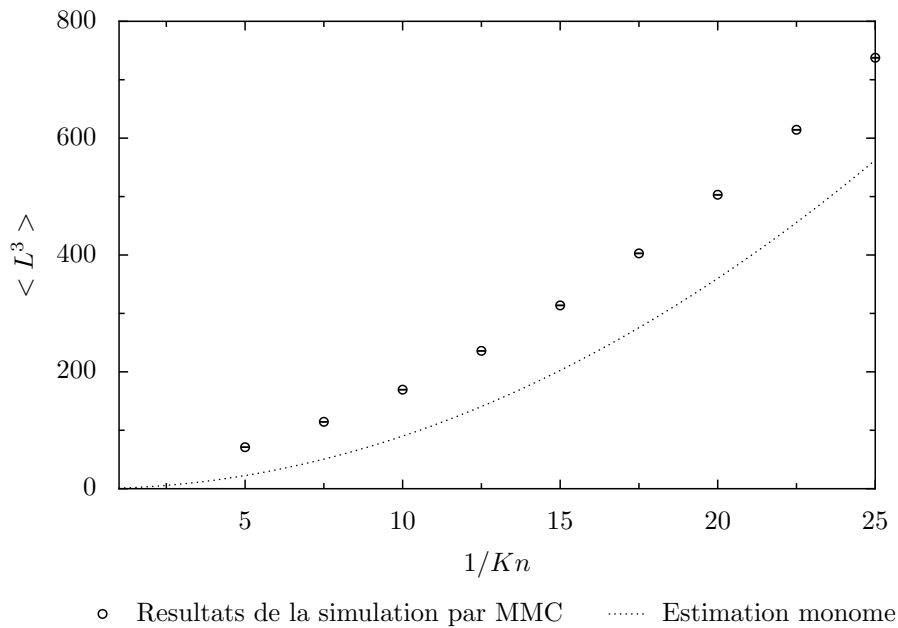


FIGURE 4.5.: Calcul de $\langle L^3 \rangle$ par la méthode de Monte-Carlo et comparaison avec la prédiction du modèle de [5], c'est à dire $\alpha_3 k_s^2$ où k_s est le coefficient de diffusion.

cul de sensibilité que celui présenté à la fin du chapitre précédent et nous observons effectivement que, comme pour le slab, $\partial_{k_s} \langle L^2 \rangle$ semble peu dépendant du nombre de Knudsen : On peut voir sur la figure 4.7 que la valeur de $\partial_{k_s} \langle L^2 \rangle$ semble constante sur la plage de K_n étudiée. Dans le dernier chapitre, nous comparerons ces valeurs à une estimation de α_2 obtenue grâce à une résolution numérique de l'équation de diffusion dans le cube et nous confirmerons alors le caractère prédictif du modèle de [5] en ce qui concerne la pente. Cependant, comme pour le slab, nous verrons que l'obtention d'un bon niveau de précision sur $\langle L^2 \rangle$ aux nombres de Knudsen intermédiaires requiert une amélioration du modèle du diffusion.

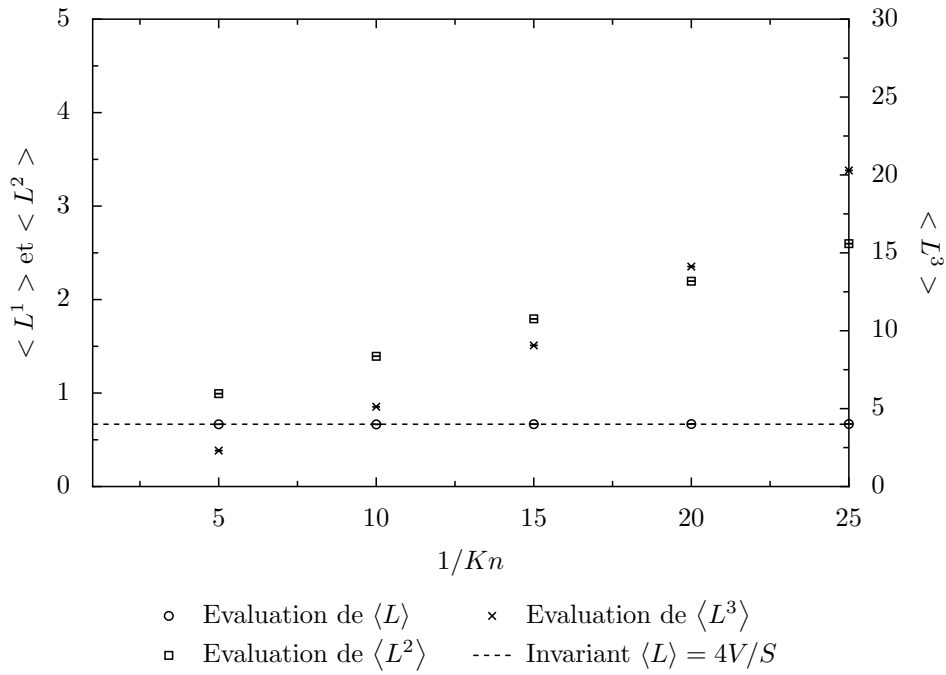


FIGURE 4.6.: Évaluation des moments d'ordre 1, 2 et 3 de la longueur des chemins de premier retour dans un cube par une méthode de Monte-Carlo pour une fonction de phase isotrope. Les résultats ont été obtenus avec 10^6 tirages pour le moments d'ordre 1, et 10^9 pour les ordres 2 et 3. Les barres d'erreurs sont représentées mais invisible à cette échelle.

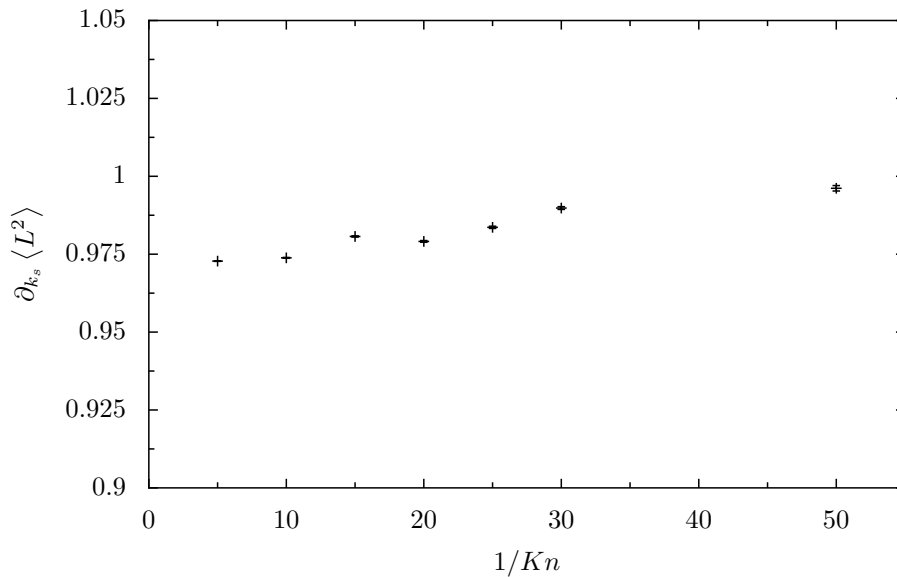


FIGURE 4.7.: Calcul de la sensibilité de $\langle L^2 \rangle$ au coefficient de diffusion k_s par la méthode de Monte-Carlo. La simulation Monte-Carlo a été effectuée dans un cube d'arête unité, utilisant 10^9 générations aléatoires.

Chapitre 5.

Étude de la statistique de premier retour aux K_n intermédiaires

Dans le chapitre 3 une méthodologie permettant de simuler la statistique des longueurs de chemins de premiers retours de type L a été présentée, basée sur une approximation de diffusion appliquée à la statistique des longueurs de chemins de premiers passages de type R . L'usage de l'approximation de diffusion limite théoriquement le domaine de validité de cette méthodologie aux faibles valeurs du nombre de Knudsen, c'est à dire aux fortes épaisseurs optiques. Le présent chapitre a pour objectif de définir une méthodologie similaire, applicable et précise aux nombres de Knudsen intermédiaires. Comme précédemment, nous nous concentrerons sur la question de l'évaluation de $\langle L^n \rangle$. Les développements seront présentés en toute généralité, mais dans le présent chapitre la mise en oeuvre ne sera proposée que pour des géométries mono-dimensionnelles. La mise en oeuvre pour des géométries quelconques est discutée dans le chapitre suivant.

Ce chapitre est assez austère car plusieurs étapes techniques sont essentielles, d'une part, pour la justification de la démarche et, d'autre part, pour la validation du modèle proposé. Nous en présentons donc tout de suite la structure en détail, de façon à ce que le lecteur puisse éventuellement contourner certains paragraphes pour aller à l'essentiel de la proposition :

- Dans le paragraphe 5.1 nous considérons le cas très particulier de particules restant sur une ligne, c'est à dire le cas d'une marche aléatoire diffuse purement mono-dimensionnelle (la fonction de phase est constituée d'un Dirac avant et d'un Dirac arrière). Dans ce cas, de nombreuses solutions analytiques sont disponibles. Nous commençons donc ce chapitre par une observation des résultats correspondant aux moments de la distribution des longueurs (c'est à dire $\langle L^n \rangle$) dans ce cas simple de façon à orienter des développements ultérieurs. Cela nous conduit à retenir l'idée d'une forme polynomiale en $\frac{1}{K_n}$ pour $\langle L^n \rangle$. Nous partons donc sur cette base pour chercher à étendre le modèle proposé dans [5], qui était un monôme d'ordre $n-1$, et dont nous avons vu au chapitre précédent qu'il posait des problèmes de précision aux valeurs de K_n intermédiaires (voir les graphes 4.4 et 4.5).
- Dans le paragraphe 5.2, nous montrons très simplement comment la structure polynomiale précédente peut être vue, dans le cas général, comme un dévelop-

pement en K_n autour de la valeur $K_n = 0$. Nous aboutissons ainsi à la forme principale du modèle proposée dans ce chapitre. Mais nous n'avons à ce stade aucune information concernant les coefficients intervenant dans ce modèle. Notamment, il n'est pas encore question, à ce stade, de statistiques de type R (de statistiques de premier passage), ni de l'emploi de l'approximation de diffusion (sauf lors des démonstrations mathématiques). Ces idées réapparaîtront dans le paragraphe 5.4 comme des moyens de déterminer rapidement (de façon approchée) les coefficients du polynôme proposé.

- Dans le paragraphe 5.3, nous mettons en oeuvre une technique fondée sur la méthode de Monte-Carlo et le calcul de sensibilités, pour accéder numériquement aux coefficients polynomiaux définis dans le paragraphe 5.2. Bien sûr, cette technique est totalement incompatible avec les objectifs de temps de calcul que nous nous sommes donnés. Cependant, cela nous permet de vérifier que la forme polynomiale proposée correspond bien à un niveau d'approximation suffisant sur la plage des valeurs de K_n qui nous intéressent. Nous faisons ici cette vérification dans le cas du slab uniquement, mais cette même vérification sera effectuée dans le cas d'un cube au chapitre suivant.
- Dans le paragraphe 5.4, nous revenons aux statistiques de type R et à l'approximation de diffusion de façon à proposer, en toute généralité, une nouvelle technique permettant d'accéder rapidement à une valeur approchée des coefficients polynomiaux précédents. Il s'agit là de reprendre une partie de la technique proposée dans [5] et de l'étendre à l'aide de l'emploi des conditions aux limites de type $P1$ ou Milnes introduites au Chapitre 2.
- Dans le paragraphe 5.5, nous mettons d'abord en oeuvre cette technique dans le cas très particulier de particules restant sur une ligne (marche aléatoire diffuse purement mono-dimensionnelle) et nous la comparons aux solutions analytiques exactes présentées dans le paragraphe 5.1.
- Enfin, dans le paragraphe 5.6, nous mettons en oeuvre cette technique sur le slab et les comparaisons sont faites par rapport aux résultats des simulations de Monte-Carlo.

Tout au long de ce chapitre, deux types de configurations seront tour à tour étudiées selon les besoins de l'argumentation :

- La diffusion mono-dimensionnelle le long d'une ligne. Il s'agit d'un problème strictement mono-dimensionnel dont la simplicité permet l'expression de solutions analytiques dans tous les cas. Ce problème sera nommé "problème de la ligne" ou "problème mono-dimensionnel pur".
- La diffusion tridimensionnelle dans une couche mono-dimensionnelle. Dans ce cas, même si en termes géométriques le problème reste mono-dimensionnel, la physique du transport est maintenant tridimensionnelle et le problème de premier retour ne peut être résolu analytiquement à l'aide de l'ETR. L'approximation de diffusion permet d'obtenir une solution analytique dans ce cas. Ce problème sera nommé "problème de la couche mono-dimensionnelle" ou "problème du slab".

5.1. Solution analytique du problème de premier retour en mono-dimensionnel pur (la ligne)

Dans ce paragraphe, nous allons proposer un développement complet sur un problème de premier retour dans un cas où nous avons accès à une solution analytique complète, exacte et manipulable. Du point de vue de la physique, il s'agit de suivre des particules qui se déplacent sur un segment (problème de la ligne) et dont les événements de collisions (avec une matière extérieure uniforme) se traduisent par un vecteur vitesse qui de façon équiprobable, soit ne change pas, soit change juste de sens (cf. graphique 5.1). Dans ce problème la description mésoscopique est grandement simplifiée puisque l'espace des directions accessibles se ramène à deux valeurs, la fonction de distribution des photons peut alors être remplacée par deux fonctions de l'espace qui décrivent les densités de photon dans les deux directions de propagation possibles. L'équation de transfert radiatif (2.32) se réécrit à partir de ces nouvelles

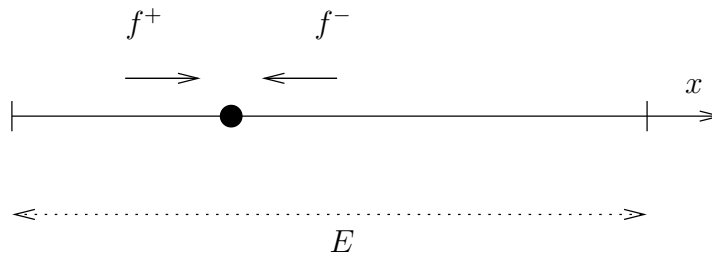


FIGURE 5.1.: Diffusion dans une situation mono-dimensionnelle pure, la ligne. L'espace des directions est réduit à deux valeurs. Le vecteur vitesse lors d'une collision prend l'une de ces valeurs de façon équiprobable. La fonction de densité peut ainsi être divisée en tout point en deux contributions f^+ et f^- .

fonctions sous la forme du système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial f^+}{\partial t} + c \frac{\partial f^+}{\partial x} = -\frac{k_s}{2} f^+ + \frac{k_s}{2} f^- \\ \frac{\partial f^-}{\partial t} - c \frac{\partial f^-}{\partial x} = -\frac{k_s}{2} f^- + \frac{k_s}{2} f^+ \end{cases} \quad (5.1)$$

où f^+ et f^- sont les fonctions densité spatiale dans les deux directions de propagation (+ et - sont les états correspondant aux particules qui vont respectivement vers E et 0), c la vitesse des photons, k_s le coefficient de diffusion. Le facteur $1/2$ qui apparaît dans les équations n'est que la traduction de la fonction de phase que nous avons décrit ci dessus.

Nous allons nous intéresser à un problème de premier retour tel que nous l'avons défini jusqu'alors, c'est à dire à un problème pour lequel les particules pénètrent dans le segment par chacun des bouts de façon équivalente et sont suivies jusqu'à leur sortie

par une des quelconques extrémités. Il n'y pas de particules dans le segment à l'instant initial. Il faut donc rajouter aux équations décrites ci dessus les conditions suivantes :

$$\begin{cases} f^+(x, t = 0) = 0 \\ f^-(x, t = 0) = 0 \\ f^+(0, t) = \frac{\delta(t = 0)}{2} \\ f^-(E, t) = \frac{\delta(t = 0)}{2} \end{cases} \quad (5.2)$$

Comme nous l'avons déjà mentionné plusieurs fois, le problème de premier retour est totalement décrit dès lors que nous avons exprimé ou calculé le flux de photons qui traverse la frontière à tout instant. Ce flux nous donne directement la distribution des temps de séjour dans le milieu, et donc la distribution des longueurs pour des particules qui se déplacent à vitesse constante. En l'occurrence ici, la grandeur que nous devons évaluer est :

$$\Phi_L(t) = f^+(E, t) + f^-(0, t) \quad (5.3)$$

N'importe quel moment de la distribution (en temps ou longueur) se déduira aisément de cette expression qui est directement une densité de probabilité en temps (la normalisation vient de ce que nous avons choisi comme conditions aux limites).

Ce problème est directement relié à ce que nous avons appelé la statistique de L dans le chapitre 3. Nous avons vu qu'il est tout à fait possible de relier la statistique de L à la statistique de R . Dans ce dernier cas le problème à traiter est celui pour lequel les particules sont présentes à l'instant initial de façon uniforme dans le segment et il ne rentre aucune particule aux extrémités. Si l'on appelle g^+ et g^- les fonctions densité spatiale dans les deux directions de propagation correspondant au problème de R , on a :

$$\begin{cases} \frac{\partial g^+}{\partial t} + c \frac{\partial g^+}{\partial x} = -\frac{k_s}{2} g^+ + \frac{k_s}{2} g^- \\ \frac{\partial g^-}{\partial t} - c \frac{\partial g^-}{\partial x} = -\frac{k_s}{2} g^- + \frac{k_s}{2} g^+ \end{cases} \quad (5.4)$$

avec :

$$\begin{cases} g^+(x, t = 0) = \frac{1}{2E} \\ g^-(x, t = 0) = \frac{1}{2E} \\ g^+(0, t) = 0 \\ g^-(E, t) = 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

Il faut noter que les champs $g^+(x, t)$ et $g^-(x, t)$ sont différents des champs de $f^+(x, t)$ et $f^-(x, t)$. Cependant le flux $\Phi_L(t) = f^+(E, t) + f^-(0, t)$ se relie aisément au flux $\Phi_R(t) = g^+(E, t) + g^-(0, t)$ grâce à la relation (3.8) énoncée au chapitre 3 :

$$P_L = - \langle L \rangle P'_R$$

Il vient donc :

$$\Phi_L(t) = -E \frac{d\Phi_R(t)}{dt} \quad (5.6)$$

Nous pouvons donc choisir de résoudre le système en f ou le système en g de façon complètement arbitraire ; nous prendrons le système en g .

La transformée de Laplace d'une fonction g par rapport au temps t s'écrit :

$$\tilde{g}(x, p) = \int_0^{+\infty} g(x, t) e^{-pt} dt \quad (5.7)$$

Ce qui nous permet d'écrire le système transformé suivant :

$$\begin{cases} c \frac{\partial \tilde{g}^+}{\partial x} = - \left(\frac{k_s}{2} + p \right) \tilde{g}^+ + \frac{k_s}{2} \tilde{g}^- + \frac{1}{2E} \\ c \frac{\partial \tilde{g}^-}{\partial x} = \left(\frac{k_s}{2} + p \right) \tilde{g}^- - \frac{k_s}{2} \tilde{g}^+ - \frac{1}{2E} \end{cases} \quad (5.8)$$

avec :

$$\begin{cases} \tilde{g}^+(x=0, p) = 0. \\ \tilde{g}^-(x=E, p) = 0. \end{cases} \quad (5.9)$$

Ce système se résout sans difficulté. La transformé de Laplace est directement une fonction génératrice des moments, on a :

$$\begin{aligned} \lim_{p \rightarrow 0} \frac{\partial^n \tilde{g}^-}{\partial p^n} \Big|_{x=0} &= \lim_{p \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} (-1)^n g^-(x=0) t^n e^{-pt} dt \\ &= (-1)^n \int_0^{+\infty} g^-(x=0) t^n dt \\ &= (-1)^n \frac{\langle R^n \rangle_{1D}}{2c} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Il faut noter que le facteur $1/c$ provient du fait que l'on passe d'une moyenne en temps à une moyenne en longueur. Le facteur $1/2$ traduit le fait que, le problème étant symétrique, ce qui sort en par la frontière située à l'origine 0 représente la moitié du total sortant. La relation (5.10) et la relation (3.15) permettent alors de donner la solution analytique des moments d'ordre n de la longueur des chemins de premier retour L .

Nous ne développons pas les calculs fastidieux mais sans difficulté. Le résultat principal que nous obtenons est le suivant :

Le moment d'ordre n de la distribution des longueurs dans le cas d'une marche aléatoire sur une ligne est exactement un polynôme de degré $n - 1$ de la variable épaisseur optique $k_s E$:

$$\langle (L/E)^n \rangle = \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{i,n} (k_s E)^i \quad (5.11)$$

n	$\beta_{0,n}$	$\beta_{1,n}$	$\beta_{2,n}$	$\beta_{3,n}$	$\beta_{4,n}$	$\beta_{5,n}$	$\beta_{6,n}$
1	1						
2	1	$\frac{1}{6}$					
3	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{20}$				
4	1	$\frac{11}{10}$	$\frac{17}{60}$	$\frac{17}{840}$			
5	1	$\frac{13}{10}$	$\frac{15}{14}$	$\frac{31}{168}$	$\frac{31}{3024}$		
6	1	$\frac{114}{28}$	$\frac{24}{7}$	$\frac{67}{63}$	$\frac{691}{5040}$	$\frac{691}{110880}$	
7	1	$\frac{15}{2}$	$\frac{121}{12}$	$\frac{899}{180}$	$\frac{8849}{7920}$	$\frac{5461}{47520}$	$\frac{5461}{1235520}$

TABLE 5.1.: Expression analytique des coefficients des 7 premiers moments de la longueur de premier retour L dans un problème purement mono-dimensionnel.

Nous reportons dans le tableau 5.1 les expressions analytiques des coefficients du polynôme correspondants aux premiers moments sous la forme (5.11).

Nous illustrons sur la figure 5.2, l'écart relatif entre la valeur des moments calculée par le monôme de rang le plus élevé et la solution exacte. Ceci nous permet de quantifier, sur ce cas précis, l'erreur associée à l'évaluation des moments par la théorie présentée au chapitre 3.

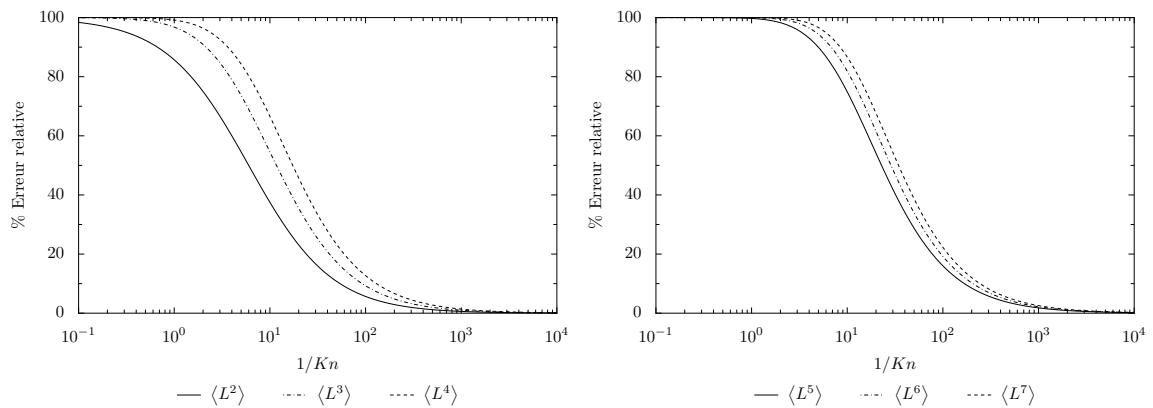


FIGURE 5.2.: Erreur relative du monôme de plus haut degré par rapport à la solution analytique dans l'évaluation de $\langle(L/E)^n\rangle$ pour une situation de diffusion mono-dimensionnelle : la ligne.

5.2. Expression polynomiale en dimension quelconque

Nous venons de voir que l'évaluation du moment d'ordre n de la longueur des chemins de premier retour L , dans le cas d'un problème purement mono-dimensionnel, à l'aide d'une résolution de l'ETR, aboutit à une forme polynomiale complète, et non

seulement à un monôme comme l'indiquait la méthodologie exposée dans [5]. Ces deux résultats ne sont bien sûr pas incompatibles car les raisonnements proposés dans [5] correspondent à la limite $K_n \rightarrow 0$ et le polynôme que nous venons de trouver se résume bien asymptotiquement à un monôme à cette limite. Lorsque le problème ne se limite pas à une propagation le long d'une ligne, lorsque que l'on passe à une diffusion tridimensionnelle, la résolution de l'équation de transport n'est plus aussi aisée et les moments de L ne peuvent plus être exprimés analytiquement par résolution de l'ETR. Nous verrons de toute façon qu'ils ne sont pas de forme polynomiale. Cependant le raisonnement mathématique qui suit permet d'étendre la forme de l'équation (5.11) aux problèmes de dimensions quelconques, en la regardant comme une approximation de la solution à la limite $K_n \rightarrow 0$. Nous nous retrouverons donc dans le même type de démarche d'approximation que celle de [5], mais le modèle que nous proposerons sera plus précis lorsque le nombre de Knudsen s'écartera de la valeur zéro (plus précis aux nombre de Knudsen intermédiaires).

Soit la fonction $f(K_n) = \frac{\langle (L/E)^n \rangle}{\frac{\alpha_n}{E^{2n-1}} \frac{1}{K_n^{n-1}}}$ définie par rapport aux raisonnements du chapitre 3 et plus particulièrement à l'équation (3.17), où E est la distance caractéristique utilisée lors de la définition du nombre de Knudsen ($K_n = \lambda^*/E$). Notamment, cette fonction admet la limite suivante : $\lim_{K_n \rightarrow 0} f(K_n) = 1$. Si on fait l'hypothèse que la fonction $f(K_n)$ admet un développement limité d'ordre $n - 1$ autour de $K_n = 0$ celui-ci s'écrit :

$$\begin{aligned} f(K_n) &= \sum_{i=0}^{n-1} a_i K_n^i + o(K_n^{n-1}) \\ &= 1 + a_1 K_n + \dots + a_{n-1} K_n^{n-1} + o(K_n^{n-1}) \end{aligned} \quad (5.12)$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\langle (L/E)^n \rangle = \frac{\alpha_n}{E^{2n-1}} \frac{1}{K_n^{n-1}} + a_1 \alpha_n \frac{1}{K_n^{n-2}} + \dots + a_{n-1} \alpha_n + o(K_n) \quad (5.13)$$

On voit bien que le monôme d'ordre supérieur correspond à la proposition faite dans [5] et qu'il s'agit ici d'une extension dont le niveau de précision est contrôlé, car nous pouvons affirmer qu'il est en $o(K_n)$. Cette expression est bien similaire à celle de l'équation (5.11) et peut se réécrire :

$$\langle (L/E)^n \rangle = \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{i,n} \frac{1}{(K_n)^i} + o(K_n) \quad (5.14)$$

avec $\beta_{n-1,n} = \frac{\alpha_n}{E^{2n-1}}$. Mais il est important de retenir que cette expression était exacte dans le cas de la ligne, alors qu'elle est une approximation en $o(K_n)$ dans le cas général.

Nous pouvons donc proposer d'approcher dans le cas général $\langle (L/E)^n \rangle$ par un polynôme d'ordre $n - 1$ en $\frac{1}{K_n}$. A ce stade, les n coefficients $\beta_{i,n}$ correspondants sont tous inconnus, sauf $\beta_{n-1,n}$ qui est connu comme la solution d'un problème de diffusion macroscopique (grâce au travail effectué dans [5] sur le monôme d'ordre supérieur).

5.3. Construction numérique des polynômes à l'aide de la MMC

Le raisonnement permettant d'aboutir à (5.14) montre que l'extension d'un comportement polynomial inspiré du cas mono-dimensionnel pur est envisageable pour toute dimension. Cependant le développement limité n'est strictement valable qu'aux alentours de $Kn = 0$. Se pose alors la question du domaine de validité. Pour répondre à cette question, nous allons dans cette partie tenter de reconstruire cette forme polynomiale à l'aide de résultats de simulations par la méthode de Monte-Carlo.

5.3.1. Principe de la méthode

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les simulations par la méthode de Monte-Carlo permettent d'obtenir des évaluations de $\langle L^n \rangle$, mais ici il s'agit de trouver les coefficients d'un développement sous une forme polynomiale de type (5.14), qui approche $\langle (L/E)^n \rangle$ avec un reste en $o(Kn)$. Comme la méthodologie exposée dans [5] permet l'évaluation du coefficient du monôme dominant, la valeur du coefficient du terme de plus haut degré $\beta_{n-1,n}$ de l'expression polynomiale est ici supposée connue. Les autres coefficients peuvent être formellement définis comme des limites de façon récursive par la relation suivante :

$$\beta_{i,n} = \lim_{u \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{\langle (L/E)^n \rangle}{u^i} - \sum_{j=i+1}^{n-1} \beta_{j,n} u^{j-i} \right\} \quad (5.15)$$

où $u = 1/Kn$ est l'épaisseur optique de diffusion.

Dans la majorité des cas, nous avons observé qu'une évaluation par la méthode de Monte-Carlo de la sensibilité à u de $\langle (L/E)^n \rangle$ induit une meilleure précision sur l'évaluation des $\beta_{1,n}$. Ce coefficient particulier peut alors être vu ainsi :

$$\beta_{1,n} = \lim_{u \rightarrow +\infty} \left\{ \partial_u \langle (L/E)^n \rangle - \sum_{j=2}^{n-1} j \beta_{j,n} u^{j-1} \right\} \quad (5.16)$$

Comme précisé dans le chapitre 4, les méthodes de Monte-Carlo ont l'avantage de donner automatiquement l'erreur statistique en plus de la valeur moyenne. La combinaison de ces erreurs statistiques sera facile à évaluer lorsque plusieurs calculs de Monte-Carlo seront employés de façon récursive pour construire les coefficients $\beta_{i,n}$. Cependant, la précision de nos calculs de Monte-Carlo est mise en défaut à très forte épaisseur optique. Le grand nombre de diffusions et l'étalement croissant de la distribution des valeurs possibles d'une réalisation de la longueur d'un chemin ou de ses puissances provoquent une augmentation de la variance statistique. Nous rencontrerons donc des difficultés lorsque nous chercherons à nous placer à de faibles nombres de Knudsen, c'est à dire à de fortes valeurs de u . À contrario, les relations récursives précédentes ne sont définies qu'à la limite $u \rightarrow +\infty$. Les conditions de simulation utilisées pour la MMC en terme de nombre de Knudsen lors de l'évaluation de la valeur des coefficients doivent donc répondre au compromis suivant :

- Situations à fortes épaisseurs optiques de diffusion, en accord avec les limites précédentes, mais où l'erreur statistique est importante ;
- Situations à plus faibles épaisseurs optiques de diffusion, pour lesquelles la validité de l'utilisation des limites précédentes est mise en question, mais où les simulations par MMC sont plus robustes.

Dans nos simulations, les valeurs de u (d'épaisseur optique) utilisées pour les évaluations des $\beta_{i,n}$ seront communément fixées à 25 ou 30.

5.3.2. Mise en oeuvre sur la couche mono-dimensionnelle

Évaluation analytique du premier terme $\beta_{n-1,n}$

Selon [5], le premier terme du polynôme est obtenu par la résolution d'un problème équivalent relatif à la longueur de premier passage R sous l'approximation de diffusion, comme rappelé dans le chapitre 3. L'expression du flux de particules sortant (3.18) dans le cas particulier d'une géométrie mono-dimensionnelle est analytique :

$$p_T^{diff}(\tau) = \frac{8}{E^2} \sum_{k=0}^{+\infty} e^{-\left(\frac{(2k+1)\pi}{E}\right)^2 \tau} \quad (5.17)$$

Ce qui appliqué à (3.15), dans le cas d'une diffusion isotrope ($k^* = k_s$) et en utilisant judicieusement la fonction Γ^1 permet d'écrire l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \langle L^n \rangle &= k_s^{n-1} \langle L \rangle n q^{n-1} \frac{(n-1)!}{(2n)!} (E)^{2n-2} 4(2^{2n} - 1) |B_{2n}| \\ \langle (L/E)^n \rangle &= (k_s E)^{n-1} \langle L/E \rangle n q^{n-1} \frac{(n-1)!}{(2n)!} 4(2^{2n} - 1) |B_{2n}| \end{aligned} \quad (5.18)$$

où q est la dimension de la physique de diffusion et B_i le i -ième nombre de Bernoulli. Les valeurs de q et $\langle L/E \rangle$ sont différentes dans le cas d'une ligne ou d'une couche mono-dimensionnelle infinie. Pour la couche (le slab), l'expression de $\beta_{n-1,n}$ est la suivante :

$$\beta_{n-1,n} = 2n 3^{n-1} \frac{(n-1)!}{(2n)!} 4(2^{2n} - 1) |B_{2n}| \quad (5.19)$$

L'évaluation du premier terme du polynôme, dans le cas d'un problème 1D, ne nécessite donc aucun calcul numérique.

Évaluation numérique des autres coefficients polynomiaux

Afin d'évaluer les valeurs du reste des coefficients $\beta_{i,n}$, nous appliquons les principes exposés dans le paragraphe 5.3.1 pour les moments d'ordre 2 et 3 de L . Les relations

1. La fonction $\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$ se simplifie lorsque la variable z appartient à l'ensemble des entier naturel. Ainsi :

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \Gamma(n+1) = n!$$

(5.15) et (5.16) sont définies pour des épaisseurs optiques infinies, cependant comme mentionné dans la discussion sur la précision de la méthode de Monte-Carlo, l'épaisseur optique utilisée pour les évaluations est un compromis entre précision statistique et validité de ce paramètre infini. En pratique, nous avons utilisé ici une épaisseur optique $u = 1/Kn = 25$, valeur maximale fournissant une marge d'erreur acceptable.

Appliquée au moment d'ordre 2, cette évaluation fournit un coefficient $\beta_{0,2}$ défini ainsi :

$$\beta_{0,2} \approx \langle (L/E)^2 \rangle_{\text{MMC}} - \beta_{1,2} u \quad (5.20)$$

où $u = 25$, $\beta_{1,2}$ étant connu grâce à la résolution analytique de l'équation de diffusion comme expliqué au paragraphe précédent, et $\langle (L/E)^2 \rangle_{\text{MMC}}$ étant calculé par une méthode de Monte-Carlo similaire à celle de l'algorithme analogue 4.2 décrit dans le chapitre précédent.

Dans le cas du moment d'ordre 3, la définition récursive (5.15) des coefficient $\beta_{i,n}$ impose d'évaluer en premier lieu le coefficient $\beta_{1,3}$. Pour des raisons de précision, cette évaluation est effectuée non pas sur un calcul direct de $\langle L^3 \rangle$ mais en choisissant d'évaluer sa sensibilité à l'épaisseur optique u : $\partial_u \langle (L/E)^3 \rangle$. L'expression de cette sensibilité sous forme de polynôme est $\partial_u \langle L^3 \rangle = 2\beta_{2,3} u + \beta_{1,3}$. Cette dernière expression fait disparaître la dépendance au paramètre encore inconnu $\beta_{0,3}$ et permet d'atteindre une précision supérieure par diminution de l'ordre du polynôme manipulé. Ainsi, l'expression de $\beta_{1,3}$ est alors :

$$\beta_{1,3} \approx \partial_u \langle (L/E)^3 \rangle_{\text{MMC}} - 2\beta_{2,3} u \quad (5.21)$$

où $u = 25$ et la sensibilité $\partial_u \langle (L/E)^3 \rangle_{\text{MMC}}$ est issue d'une évaluation par méthode de Monte-Carlo. La valeur $\beta_{2,3}$ est quant à elle acquise par la résolution analytique de l'équation de diffusion. Nous précisons que le calcul de sensibilité est effectué simultanément à celui de $\langle (L/E)^3 \rangle$ selon une variante de l'algorithme 4.2 comme il est mentionné dans 4.4.

Enfin, la valeur du coefficient $\beta_{1,3}$ étant maintenant évaluée, celle du coefficient $\beta_{0,3}$ répond à l'équation :

$$\beta_{0,3} \approx \langle (L/E)^3 \rangle_{\text{MMC}} - \beta_{2,3} u^2 - \beta_{1,3} u \quad (5.22)$$

Sont représentés sur les graphes 5.3, 5.4 et 5.5 les résultats des simulations de Monte-Carlo des différents $\beta_{i,n}$ en fonction de l'épaisseur optique $u = 1/Kn$ ainsi que la valeur estimée pour $u = 25$. Ces graphes mettent en avant l'évolution des valeurs $\beta_{i,n}$ vers une constante en fonction de l'épaisseur optique croissante u utilisée dans les relations (5.20), (5.21) et (5.22). Valeurs et écart-types définis par la méthodologie sont regroupés dans le tableau 5.2 où les nombres de Knudsen utilisés pour les évaluations numériques sont indiquées.

Finalement, les graphes 5.6 et 5.8 représentent les résultats des évaluations de $\langle (L/E)^2 \rangle$ et $\langle (L/E)^3 \rangle$ par la méthode de Monte-Carlo et par les polynômes reconstruits. Les graphes 5.7 et 5.9 présentent les mêmes résultats de comparaison en termes

n	$\beta_{0,n}$	$\sigma_{\beta_{0,n}}$	$\beta_{1,n}$	$\sigma_{\beta_{1,n}}$	$\beta_{2,n}$	$\sigma_{\beta_{2,n}}$
1	2	0	0	0	0	0
2	4.3492 ₍₂₅₎	0.004913	1	0	0	0
3	11.1108 ₍₂₅₎	2.3790	6.2965 ₍₂₅₎	0.3621	0.9	0

TABLE 5.2.: Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ à partir de simulations de Monte-Carlo à 10^9 tirages dans une couche mono-dimensionnelle infinie d'épaisseur $E = 1$. L'épaisseur optique de diffusion ($\frac{1}{Kn}$) utilisée pour chaque estimation est indiquée entre parenthèses.

d'erreurs relatives. La référence est le calcul de $\langle (L/E)^n \rangle$ par Monte-Carlo et on voit que le fait d'utiliser la forme polynomiale à la place de la solution exacte conduit à des erreurs relatives tout à fait acceptables dans la plage de Knudsen qui nous intéresse.

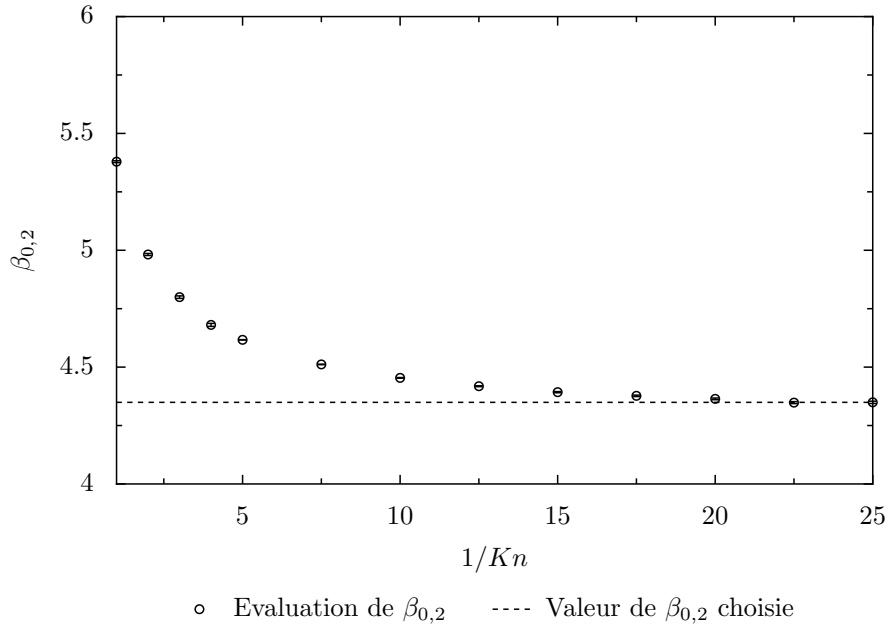


FIGURE 5.3.: Évaluation de $\beta_{0,2}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo. 10^7 générations aléatoires ont été utilisées pour les épaisseurs optiques entre 1 et 4, 10^9 ensuite.

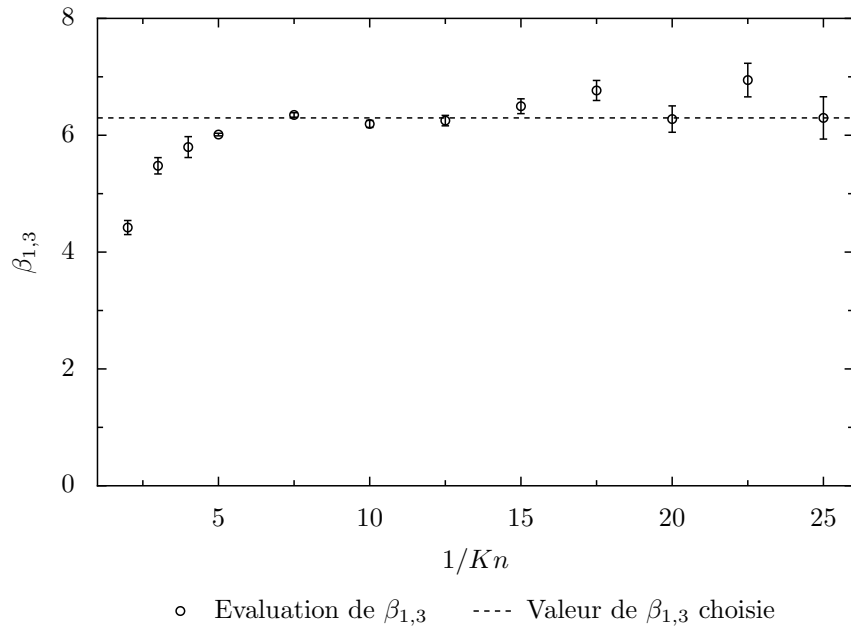


FIGURE 5.4.: Évaluation de $\beta_{1,3}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo. 10^7 générations aléatoires ont été utilisées pour les épaisseurs optiques entre 1 et 4, 10^9 ensuite.

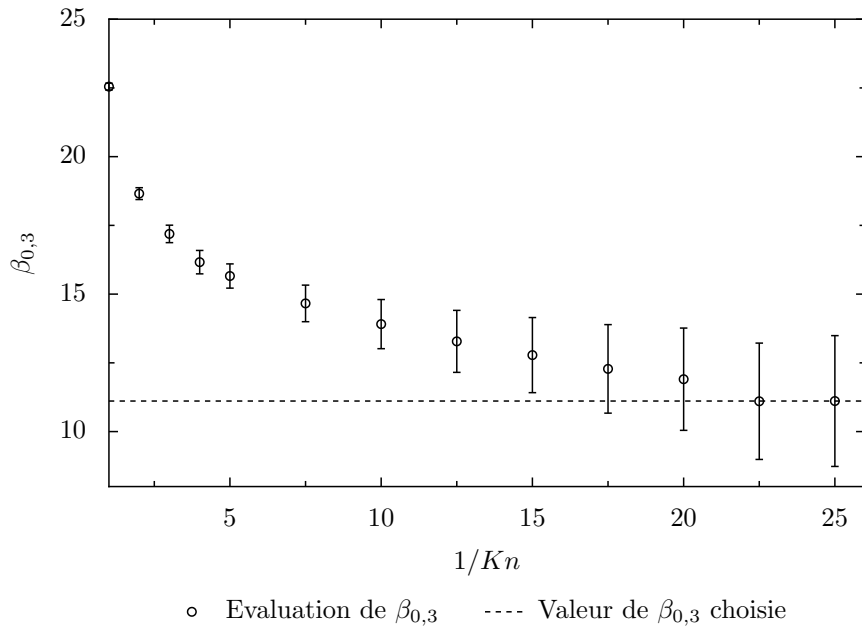


FIGURE 5.5.: Évaluation de $\beta_{0,3}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo. 10^7 générations aléatoires ont été utilisées pour les épaisseurs optiques entre 1 et 4, 10^9 ensuite.

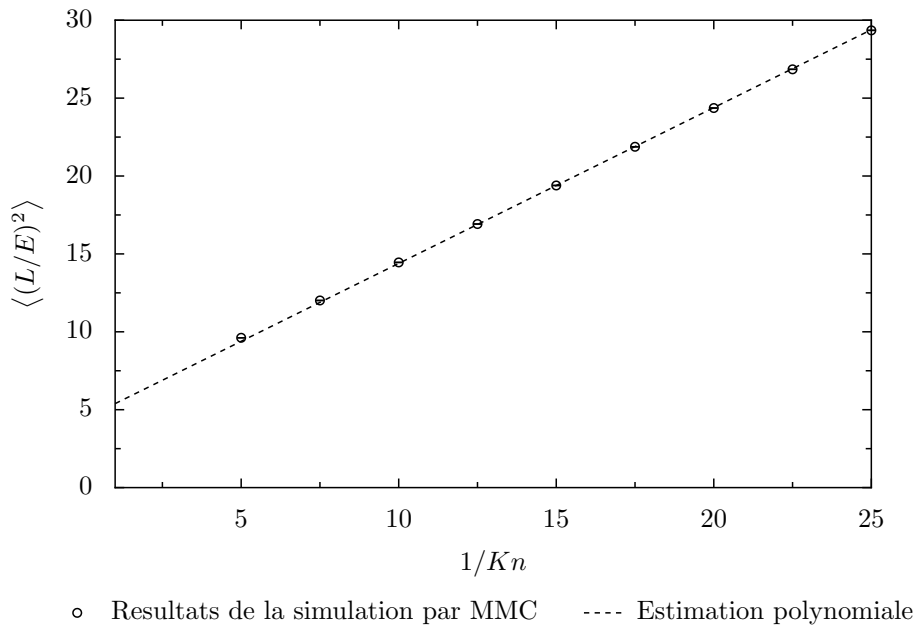


FIGURE 5.6.: Évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo et représentation graphique du polynôme reconstruit à partir de ces résultats (10^9 générations aléatoires ont été utilisées pour la MMC).

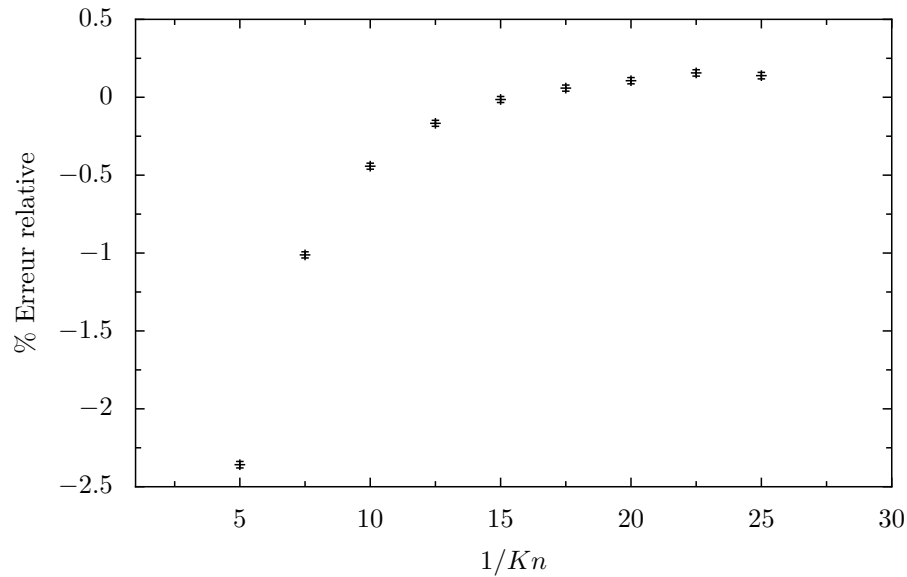


FIGURE 5.7.: Erreur relative associée à l'utilisation de la forme polynomiale pour l'évaluation de $\langle(L/E)^2\rangle$. Les conditions de simulation sont celles de la figure 5.6

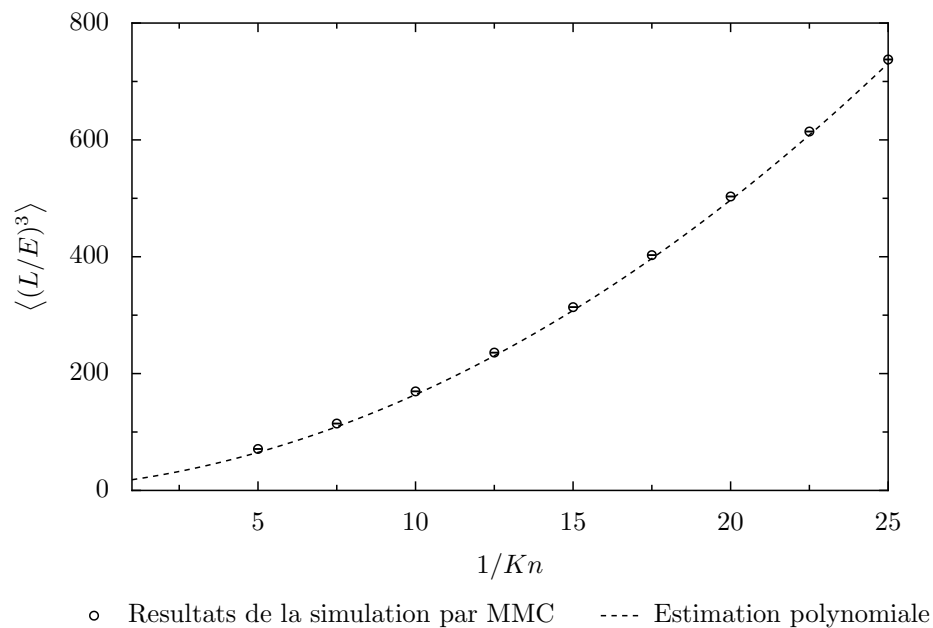


FIGURE 5.8.: Évaluation de $\langle(L/E)^3\rangle$ par une méthode de Monte-Carlo et représentation graphique du polynôme reconstruit à partir de ces résultats (10^9 générations aléatoires ont été utilisées pour la MMC).

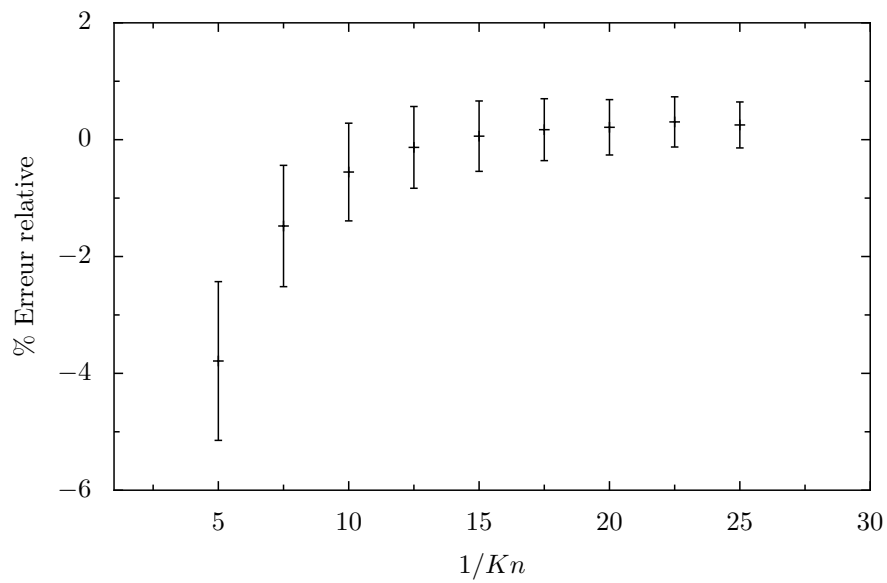


FIGURE 5.9.: Erreur relative associée à l'utilisation de la forme polynomiale pour l'évaluation de $\langle(L/E)^3\rangle$. Les conditions de simulation sont celles de la figure 5.8

5.4. Utilisation de l'approximation de diffusion

Les résultats du paragraphe précédent confirment qu'il est raisonnable de partir sur la base d'une approximation polynomiale d'ordre $n - 1$ en $1/K_n$ pour l'analyse du moment d'ordre n de la statistique des longueurs des chemins de premier retour. Par contre, à ce stade, nous ne disposons d'aucun moyen rapide pour accéder aux coefficients du polynôme. Ce constat est vrai à l'exception du monôme d'ordre supérieur dont nous avons vu qu'il est accessible à l'aide de la résolution du problème de diffusion introduit dans [5] : un problème de type R (sources uniformes isotropes dans le domaine), traité par l'approximation de diffusion, avec une densité nulle comme condition à la limite.

Nous allons proposer une approche permettant de trouver une valeur approchée des coefficients manquants ($\beta_{i,n}$ pour $i < n - 1$) qui s'inspire de celle permettant de trouver $\beta_{n-1,n}$. Il s'agira de prendre comme point de départ la même statistique R des longueurs de chemins de premier passage, mais d'être plus précis en termes de conditions aux limites lors de l'utilisation de l'approximation de diffusion. Pour en arriver à cette proposition, nous allons commencer par analyser en détail l'erreur commise lors de l'application de l'approximation de diffusion telle que proposée dans [5], c'est à dire avec une densité nulle comme condition à la limite.

5.4.1. Mise en évidence et analyse de l'erreur associée à l'approximation de diffusion avec densité nulle à la frontière

A la fin du chapitre précédent, nous avons proposé des résultats de simulation numérique de $\langle L^2 \rangle$ et $\langle L^3 \rangle$ pour le slab de façon à illustrer le niveau d'incertitude associée à la forme monomiale proposée dans [5]. Comme prévu théoriquement, le monôme est indistinguable de la solution exacte à la limite $K_n \rightarrow 0$, mais nous avons vu que les erreurs relatives restent importantes dans la plage de Knudsen qui nous intéresse d'un point de vue applicatif. Nous rappelons ces résultats dans les figures 5.10 et 5.11 en y adjoignant l'estimation polynomiale précédente. Nous pouvons également de nouveau illustrer ce constat en reprenant le cas académique de la diffusion le long d'une ligne. Dans ce cas, il n'y a plus aucune question de convergence nous empêchant d'étudier la limite $K_n \rightarrow 0$ car les solutions sont toutes analytiques (à la fois pour la solution exacte de la diffusion multiple et pour l'approximation de diffusion). La figure 5.12 montre qu'il faut atteindre une épaisseur optique avoisinant 1000 avant d'espérer, avec le monôme, des erreurs relatives de l'ordre du pourcent pour les premiers moments (ici nous pouvons monter au delà du moment d'ordre 3 car tous les calculs sont analytiques et nous ne rencontrons pas les difficultés de convergence de la méthode de Monte-Carlo). Le monôme est donc clairement insuffisant pour la plage de Knudsen qui nous intéresse. Or le monôme résulte directement de l'application de l'approximation de diffusion à la statistique des chemins de premier passage R , telle qu'elle a été proposée dans [5]. Si nous cherchons à comprendre en quoi cette approximation est insuffisante, nous devons soit incriminer l'utilisation d'une loi de Fick pour le flux de particule en tout point du domaine, soit incriminer le fait d'avoir choisi

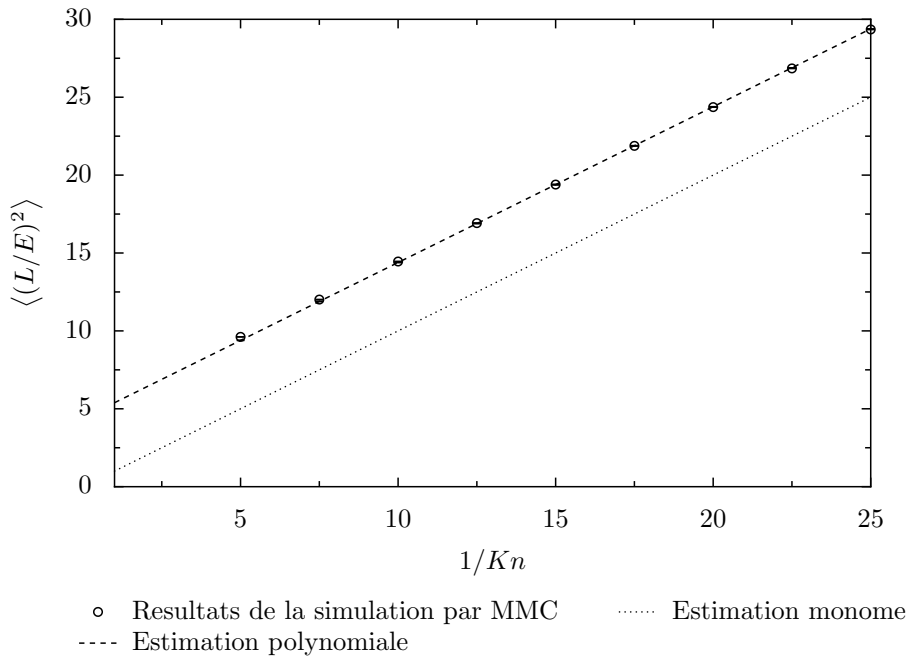


FIGURE 5.10.: Comparaison de l'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo à 10^9 générations et par le monôme. Le polynôme construit à partir de la MMC est donné à titre indicatif.

l'imposition d'une densité nulle comme condition à la frontière. Pour explorer cette question, nous nous plaçons encore une fois dans le cas de la ligne et nous ne considérons maintenant que des particules initialement à une position x_0 dans le segment $[0, E]$ (distribution initiale correspondant à un Dirac en x_0). Nous pouvons calculer par Monte-Carlo les moments de la distance parcourue avant premier passage à la frontière, que nous traduisons en termes de moments de la statistique des temps de premier passage $\langle t^n \rangle$ en supposant un déplacement à module de vitesse v constant. Nous pouvons alors comparer ces résultats de référence à la solution approchée correspondant à l'approximation de diffusion telle qu'elle a été mise en oeuvre dans [5]. Cette solution est analytique en géométrie mono-dimensionnelle comme nous l'avons vu en 2.4.2. Rappelons le système d'équations :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (5.23)$$

associé aux conditions :

$$\begin{cases} \rho(x, t_0) = \delta(x - x_0) \\ \rho(0, t) = 0 \\ \rho(E, t) = 0 \end{cases} \quad (5.24)$$

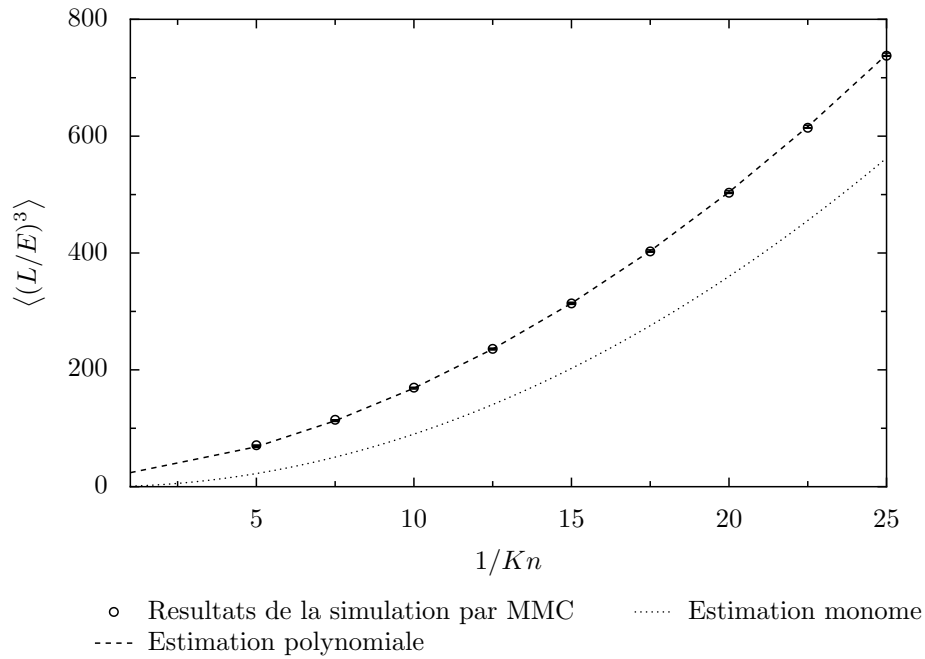


FIGURE 5.11.: Comparaison de l'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo à 10^9 générations et par le monôme. Le polynôme construit à partir de la MMC est donné à titre indicatif.

où E est la longueur de la ligne et D le coefficient de diffusion macroscopique²

La solution analytique est donnée sous forme de série (donnée dans la partie 2.4.2 en fonction de la variable τ) :

$$\rho(x, t) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{2}{E} \sin\left(\frac{k\pi x_0}{E}\right) \sin\left(\frac{k\pi x}{E}\right) \exp\left(-\left(\frac{k\pi}{E}\right)^2 Dt\right) \quad (5.25)$$

Le moment d'ordre n du temps de résidence a alors la forme suivante :

$$\langle t^n \rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{2Dk\pi}{E^3} [1 - \cos(k\pi)] \sin\left(\frac{k\pi x_0}{E}\right) \left[\frac{1}{D} \left(\frac{E}{k\pi}\right)^2\right]^{n+1} n! \quad (5.26)$$

Le graphe 5.13 présente la comparaison du moment d'ordre 1 du temps de résidence ainsi obtenu à la solution de référence donnée par Monte-Carlo, en fonction de la position d'origine x_0 du Dirac pour 3 valeurs de l'épaisseur optique de diffusion. En complément est donné un extrait des résultats dans le tableau 5.3.

Une observation très marquante peut être rapidement faite concernant ces résultats : manifestement, l'écart entre le résultat de l'approximation de diffusion et la solution

2. Ce coefficient est défini comme $D = \frac{vl_s}{q}$ où v est la vitesse des particules, l_s le libre parcours moyen de diffusion et q la dimension de la physique de diffusion. Tout comme dans (5.18) le paramètre q permet de traiter par le même système d'équation les deux situations mono-dimensionnelles : la ligne et la couche.

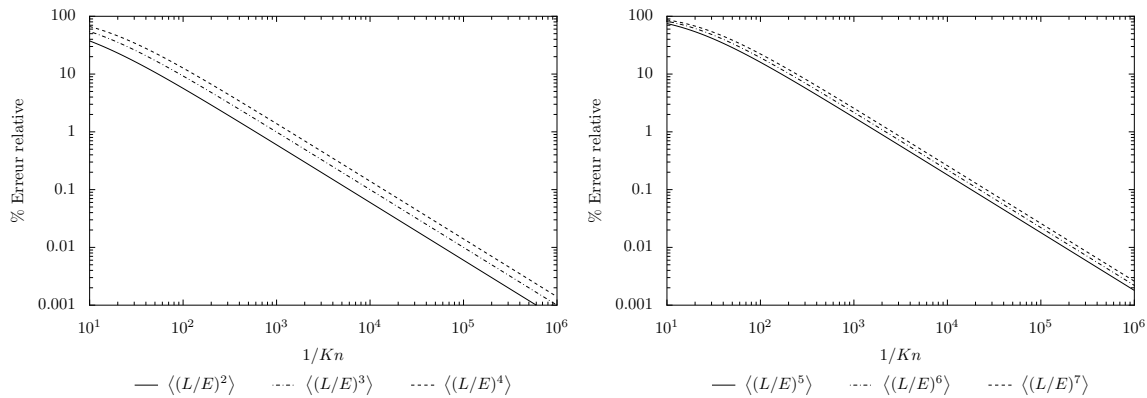


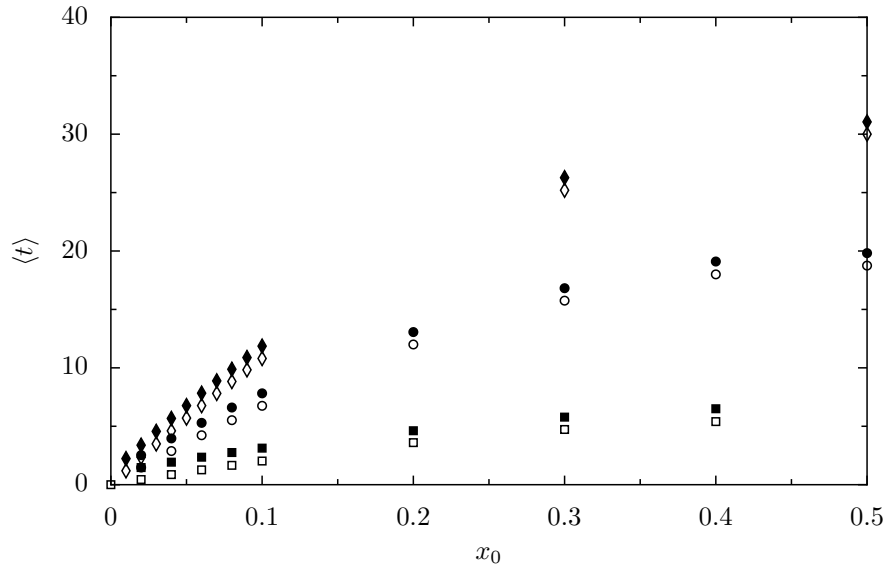
FIGURE 5.12.: Erreur relative du monôme par rapport à la solution analytique dans l'évaluation de $\langle (L/E)^n \rangle$ pour une situation de diffusion mono-dimensionnelle : la ligne.

de Monte-Carlo (qui peut être considérée comme la référence étant donné le niveau de convergence) est quasiment indépendant de la position (sauf très près du bord, en gros à des distances de l'ordre du libre parcours moyen). Tout se passe comme si l'approximation de diffusion rendait très bien compte de la diffusion des particules dans le champ, mais qu'une erreur significative était commise au passage à la paroi.

Cela nous invite bien sûr fortement à questionner la condition aux limites employée. Or, nous avons vu dans la partie 2.3.2 que des travaux approfondis ont été menés concernant les conditions aux limites compatibles avec l'approximation de diffusion. C'est donc dans cette direction que nous nous orientons pour tenter d'améliorer le modèle et faire la jonction avec le développement polynomial introduit précédemment.

5.4.2. Proposition de correction de la condition à la paroi

Un rapide retour à la description physique du problème au niveau de la paroi permet de proposer une correction par rapport au choix d'une densité nulle pour représenter le fait qu'il n'y a, dans le problème de type R , aucune particule entrante à la frontière du domaine. Comme décrit dans le chapitre 2, le passage d'une description mésoscopique à une description macroscopique impose la perte de l'information directionnelle concernant la distribution statistique des particules. Cette perte d'information se retrouve dans l'établissement de la condition à la frontière dans l'équation de diffusion : nous ne pouvons pas assurer rigoureusement la condition physique « aucune particule n'entre par la frontière » car nous ne disposons d'informations que sur la densité et le flux net de particules. Nous avons vu que cette question a donné lieu à une littérature abondante et qu'une condition à la limite souvent employée pour contourner cette difficulté s'obtient en appliquant l'approximation P1 à la distribution angulaire des particules près du bord. Nous avons également mentionné la condition aux limites de Milne, qui a la même forme mathématique que la condition P1, mais avec un coefficient différent (voir le paragraphe 2.3.2).



- Evaluation pour $1/Kn = 15$ par diffusion
- Evaluation pour $1/Kn = 15$ par MMC
- Evaluation pour $1/Kn = 50$ par diffusion
- Evaluation pour $1/Kn = 50$ par MMC
- ◇ Evaluation pour $1/Kn = 80$ par diffusion
- ◆ Evaluation pour $1/Kn = 80$ par MMC

FIGURE 5.13.: Évaluation de $\langle t \rangle$, temps de résidence moyen prévu par l'approximation de diffusion telle que mise en oeuvre dans [5] pour un Dirac en x_0 sur une ligne de longueur $E = 1$ et pour un module de vitesse unité. La méthode de Monte-Carlo qui sert de référence a utilisé 10^7 tirages.

Au vu du constat que la condition de densité nulle à la paroi est manifestement la première à incriminer comme origine des erreurs associées au modèle de [5] lorsqu'on tente de l'appliquer aux nombres de Knudsen intermédiaires, nous proposons donc de remplacer cette condition par une condition de type P1 ou Milne et de tenter ainsi d'établir un lien avec le développement polynomial proposé plus haut.

En toute généralité, et en reprenant les notations du chapitre 2 et du chapitre 3, le modèle devient donc le suivant :

- Nous repartons de l'équation (3.10) permettant de relier l'espérance de $f(L)$ à celle de $f'(R)$, soit

$$\langle f(L) \rangle = \langle L \rangle \langle f'(R) \rangle + f_0 \quad (5.27)$$

pour toute fonction f admettant une limite f_0 en zéro et vérifiant $(p_R f)_{+\infty} = 0$ (c'est à dire essentiellement qui croit moins vite que l'exponentielle en $+\infty$). À ce stade aucune approximation n'est introduite.

- Nous remplaçons alors la variable aléatoire R par une approximation consistant à appliquer l'approximation de diffusion pour tous les chemins de premier passage, avec une condition à la frontière de type P1 (ou Milne). On note $R^{diff-P1}$ cette nouvelle variable aléatoire et on retient donc

$$\langle f(L) \rangle \approx \langle L \rangle \langle f'(R^{diff-P1}) \rangle + f_0 \quad (5.28)$$

$1/Kn$	x_0	$\langle t \rangle$	$\langle t \rangle_{MMC}$	$\sigma_{\langle t \rangle_{MMC}}$	$\Delta \langle t \rangle$
15	0.02	0.441	1.46503	0.00344352	1.02
15	0.04	0.864	1.92707	0.00385482	1.06
15	0.3	4.725	5.78222	0.00170047	1.06
15	0.4	5.4	6.49866	0.00168998	1.1
50	0.02	1.47	2.52891	0.00794367	1.05891
50	0.04	2.88	3.96017	0.00971613	1.08017
50	0.3	15.75	16.8159	0.0159703	1.0659
50	0.4	18	19.1001	0.0161708	1.1001
80	0.02	2.352	3.37985	0.0114343	1.02785
80	0.04	4.608	5.66985	0.0146375	1.06185
80	0.3	25.2	26.2751	0.0250446	1.0751
80	0.5	30	31.0478	0.0253275	1.0478

TABLE 5.3.: Extrait des données de simulation de $\langle t \rangle$, temps de résidence moyen prévu par l'approximation de diffusion telle que mise en oeuvre dans [5] pour un Dirac en x_0 sur une ligne de longueur $E = 1$ et pour un module de vitesse unité. La méthode de Monte-Carlo qui sert de référence a utilisé 10^7 tirages. $\Delta \langle t \rangle$ représente la différence entre les deux temps de résidence.

Comme dans l'équation 3.13 au chapitre 3, nous effectuons un changement de variable permettant de raisonner en temps et l'espérance $\langle f'(R^{diff-P1}) \rangle$ peut alors s'écrire

$$\langle f'(R^{diff-P1}) \rangle = nq^{n-1} \int_0^{+\infty} p_T^{diff-P1}(t) f'(vt) dt \quad (5.29)$$

où $p_T^{diff-P1}(t)$ s'obtient par la résolution instationnaire de l'équation de diffusion macroscopique, soit

$$p_T^{diff-P1}(t) = \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot D \nabla \rho|_{\mathbf{y},t} d\mathbf{y} \quad (5.30)$$

avec

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (D \nabla \rho) \quad (5.31)$$

$$D = \frac{v}{qk^*} \quad (5.32)$$

la condition initiale étant uniforme (en accord avec la définition de R), soit

$$\rho(\mathbf{x}, t = 0) = \rho_0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (5.33)$$

et la condition à la frontière correspondant à l'approximation $P1$, soit (approximation décrite dans la partie 2.3.2) :

$$\rho(\mathbf{x}, t) + (\chi\gamma) \frac{l^*}{q} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (5.34)$$

où q est la dimension de la physique de diffusion, γ un paramètre dépendant de la physique de diffusion dont les 4 valeurs possibles sont données dans le tableau 5.4, l^* est le libre parcours de transport. Les paramètres q et γ sont introduits afin de pouvoir écrire un formalisme indépendant de la dimension physique du problème. Le paramètre χ (cf . paragraphe 2.3.2) permet de différencier une condition P1 stricte ou corrigée par le problème de Milne.

Cas	1D pur	2D	couche mono-dimensionnelle	3D
γ	1	$\frac{\pi}{2}$	2	2

TABLE 5.4.: Valeurs du paramètre γ

Un point très important par rapport à ce que nous avons décrit au chapitre 3 est que ce modèle fournit des informations différentes pour chaque valeur du nombre de Knudsen. Dans l'équation 3.15, nous avons introduit un temps adimensionnel $\tau = Dt$ ce qui nous avait permis de réécrire le problème d'une façon telle que le nombre de Knudsen disparaissait. On établissait ainsi une similitude entre tous les problèmes diffusifs correspondant à l'ensemble des valeurs possibles du nombre de Knudsen. Ce résultat est bien connu pour l'équation de diffusion avec des conditions aux limites de densité fixe à la frontière. Ce n'est plus le cas pour $R^{diff-P1}$. Cela dans notre contexte un gros avantage : dans le chapitre 3 la solution de l'équation de diffusion ne pouvait nous apporter qu'une seule information et cette information était le coefficient du monôme (α_n qui est devenu à une constante près $\beta_{n-1,n}$ dans nos nouvelles notations) ; mais maintenant des études de $R^{diff-P1}$ pour des nombres de Knudsen différents apporteront des informations différentes, ce qui nous permettra de trouver l'ensemble des coefficients du développement polynomial.

5.4.3. Synthèse de la démarche de modélisation proposée pour le moment d'ordre n

Revenons au cas particulier du moment d'ordre n de la distribution des longueurs de chemin de premier retour, soit $\langle L^n \rangle$, c'est à dire au cas particulier de la fonction $f(x) = x^n$. La démarche de modélisation que nous proposons se résume alors de la façon suivante :

- Tout d'abord nous partons de l'idée que le développement polynomial de l'équation 5.14 est une bonne approximation de $\langle L^n \rangle$ sur la plage des nombres de Knudsen qui nous intéressent d'un point de vue applicatif.
- Nous proposons donc un modèle ayant cette forme et toute la question est alors d'en déterminer les coefficients de façon rapide.

- Le coefficient du monôme d'ordre supérieur correspond à la proposition faite dans [5]. Nous pouvons donc en connaître sa valeur en résolvant un problème de diffusion avec une densité nulle à la frontière.
- Pour accéder aux autres coefficients, nous conservons l'idée de ne pas utiliser de techniques plus exigeantes numériquement que la résolution de l'équation de diffusion macroscopique, mais nous affinons la condition à la limite en utilisant l'approximation P1 ou la condition de Milne.
- Nous avons donc besoin de $n - 1$ résolutions de l'équation de diffusion macroscopique avec condition aux limites P1, pour des nombres de Knudsen différents, si nous voulons espérer accéder aux $n - 1$ coefficients manquants (les nombres de Knudsen retenus pour ces $n - 1$ résolutions supplémentaires devant bien sûr être dans la plage pour laquelle le développement polynomial assure un bon niveau d'approximation de la solution exacte).

Dans la fin de ce chapitre, nous allons tester cette démarche en nous restreignant aux géométries mono-dimensionnelles, c'est à dire à la ligne et au slab, et les questions posées par les géométries tridimensionnelles seront spécifiquement abordées dans le chapitre suivant.

5.5. Mise en oeuvre sur la ligne

Nous testons tout d'abord la proposition précédente dans le cas de la ligne. Dans ce cas, nous savons que nous disposons

- d'une solution analytique nous donnant une référence exacte (voir paragraphe 5.1) ;
- et d'une solution analytique de la diffusion avec densité nulle au bord (à partir des solutions données au paragraphe 2.4.2) nous permettant de calculer le coefficient du monôme d'ordre supérieur.

Il nous reste à considérer la solution du problème de diffusion avec une condition de type P1 aux bords. La géométrie étant mono-dimensionnelle, nous montrons en annexe A que ce nouveau problème de diffusion admet également une solution analytique. Un point très important, car il peut être source de confusion, est que cette solution analytique est de forme polynomiale ! Il faut bien comprendre ici que ceci n'a rien à voir avec le développement polynomial dont nous avons parlé précédemment. En effet, il se trouve que dans le cas de la ligne :

- La solution exacte de transport particulaire est de forme polynomiale (c'est ce constat qui nous a mis sur la voie du développement polynomial proposé en toute généralité au paragraphe 5.2) ;
- La solution analytique de l'équation de diffusion macroscopique avec condition aux limites P1 est également polynomiale (ceci ne sera pas vrai en toute généralité) ;
- Les coefficients de ces deux polynômes d'origines différentes, seront différents.

Le tableau 5.5 résume les valeurs des coefficients ainsi obtenus. Comme nous le savions déjà, le coefficient du monôme d'ordre supérieur est le même dans les deux cas. Cela était déjà assuré par la proposition de [5]. Mais nous voyons que le coefficient du

monôme d'ordre immédiatement inférieur est également le même dans les deux cas. En particulier cela signifie que notre modèle est exact pour le moment d'ordre 2, soit $\langle L^2 \rangle$, quelque soit la valeur du nombre de Knudsen. Les graphes 5.14, 5.15 et 5.16 illustrent le comportement de notre modèle jusqu'au moment d'ordre 4. Au delà, nous n'avons pas encore réussi à mener à termes les calculs analytiques de l'annexe A. Nous voyons sur ces courbes que le gain de précision est très significatif par rapport au monôme sur la plage des nombres de Knudsen intermédiaires qui nous intéressent dans ce travail.

5.6. Mise en oeuvre sur le slab

Nous testons ensuite notre modèle dans le cas du slab (avant de passer aux géométries tridimensionnelles dans le chapitre suivant). Par rapport au cas de la ligne, la situation est la suivante :

- Aucune solution exacte n'est disponible. Notre référence sera donc basée sur les résultats des simulations de Monte-Carlo.
- Nous avons vu au paragraphe 5.3 que le développement polynomial est pertinent sur la plage de Knudsen qui nous intéresse et nous disposons d'une évaluation numérique des coefficients de ce développement (toujours par la méthode de Monte-Carlo).
- Le problème diffusif est mono-dimensionnel, comme dans le cas de la ligne. Nous savons donc que la solution de la diffusion avec conditions aux limites de type P1 a une forme polynomiale (ce qui, encore une fois, n'a aucune valeur de généralité) et nous avons accès aux coefficients de ce polynôme grâce aux résultats de l'annexe A.
- Par contre, nous disposons de deux solutions possibles : celle correspondant à la condition aux limites P1 au sens strict et celle correspondant à la condition de Milne (la forme étant la même mais le coefficient apparaissant ayant une valeur légèrement différente, voir le paragraphe 2.3.2 au chapitre 2).

Le tableau 5.6 résume les valeurs des coefficients polynomiaux résultants. Comme précédemment, le coefficient du monôme d'ordre supérieur est le même dans tous les cas car cela correspond à la proposition de [5]. Par contre, le coefficient du monôme d'ordre immédiatement inférieur n'est plus rigoureusement assuré par notre modèle. On voit cependant que la prédiction correspondant à la condition de Milne est très proche : 4.26 pour 4.35 en ce qui concerne $\beta_{0,2}$ et 6.39 pour 6.30 + / - 0.36 en ce qui concerne $\beta_{1,3}$. Même si nous ne disposons pas d'argument théorique supplémentaire, cela nous conduit à conclure qu'il est probablement préférable de retenir la condition de Milne plutôt que la condition P1 lors de la mise en oeuvre de notre modèle. C'est ce que nous ferons au chapitre suivant dans le cas du cube. Les graphes 5.17 et 5.18 illustrent le comportement de notre modèle pour les deux premiers moments et nous voyons que, vis à vis de nos objectifs, nous atteignons de bons niveaux de précisions jusqu'à des nombres de Knudsen de 1/5 et qu'en tout cas le gain de précision est très significatif par rapport aux prédictions associées au seul monôme pour les nombres de

Ligne analytique				
n	$\beta_{0,n}$	$\beta_{1,n}$	$\beta_{2,n}$	$\beta_{3,n}$
1	1			
2	1	$\frac{1}{6}$		
3	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{20}$	
4	1	$\frac{11}{10}$	$\frac{17}{60}$	$\frac{17}{840}$

P1 strict ligne				
n	$\widetilde{\beta}_{0,n}$	$\widetilde{\beta}_{1,n}$	$\widetilde{\beta}_{2,n}$	$\widetilde{\beta}_{3,n}$
1	1			
2	1	$\frac{1}{6}$		
3	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{20}$	
4	3	$\frac{3}{2}$	$\frac{17}{60}$	$\frac{17}{840}$

TABLE 5.5.: Récapitulatif des résultats sur la ligne en termes de coefficients polynomiaux : solution exacte et solution correspondant à $R^{diff-P1}$.

Knudsen intermédiaires.

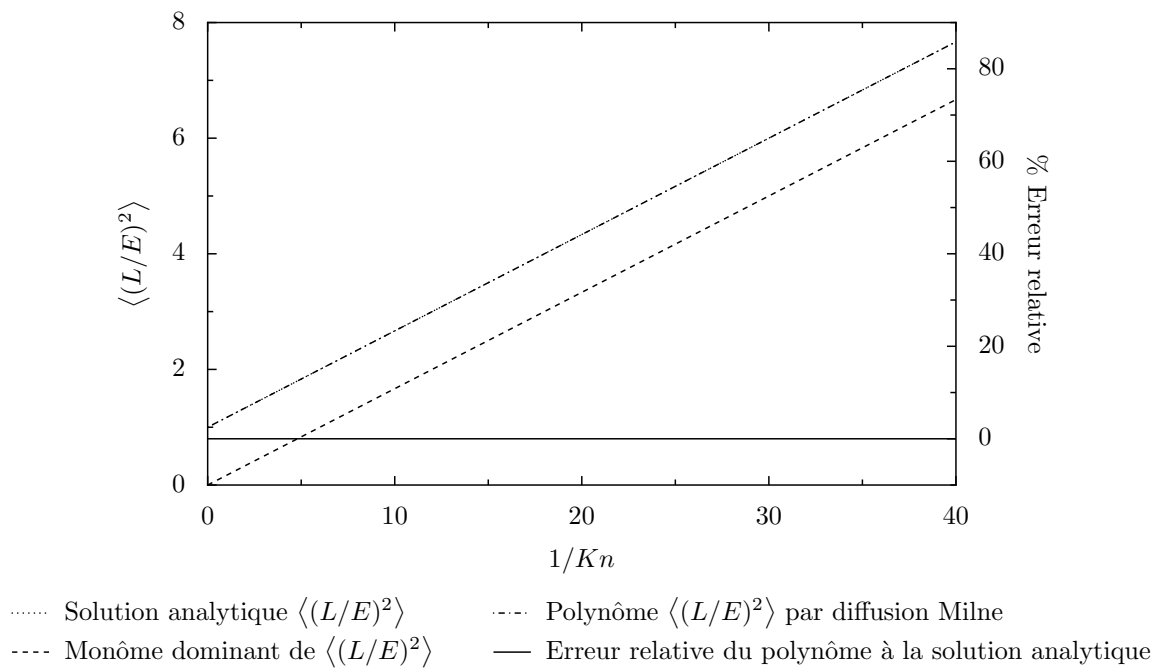


FIGURE 5.14.: Comportement du modèle pour la ligne : Moment d'ordre 2.

P1 strict slab					P1 Milne slab				
n	$\widetilde{\beta}_{0,n}$	$\widetilde{\beta}_{1,n}$	$\widetilde{\beta}_{2,n}$	$\widetilde{\beta}_{3,n}$	n	$\widetilde{\beta}_{0,n}$	$\widetilde{\beta}_{1,n}$	$\widetilde{\beta}_{2,n}$	$\widetilde{\beta}_{3,n}$
1	2				1	2			
2	4	1			2	4.2624	1		
3	12	6	0.9		3	13.626	6.3936	0.9	
4	48	36	10.2	1.0929	4	58.0796	40.8781	10.8691	1.0929

Évaluation Monte-Carlo slab						
n	$\beta_{0,n}$	$\sigma_{\beta_{0,n}}$	$\beta_{1,n}$	$\sigma_{\beta_{1,n}}$	$\beta_{2,n}$	$\sigma_{\beta_{2,n}}$
1	2	0	0	0	0	0
2	4.3492 ₍₂₅₎	0.004913	1	0	0	0
3	11.1108 ₍₂₅₎	2.3790	6.2965 ₍₂₅₎	0.3621	0.9	0

TABLE 5.6.: Récapitulatif des résultats sur le slab en termes de coefficients polynomiaux : Évaluation par Monte-Carlo (servant de référence) et solution correspondant à $R^{diff-P1}$ avec la condition aux limites P1 stricte, d'une part, et la solution correspondant à $R^{diff-P1}$ avec la condition aux limites de Milne, d'autre part.

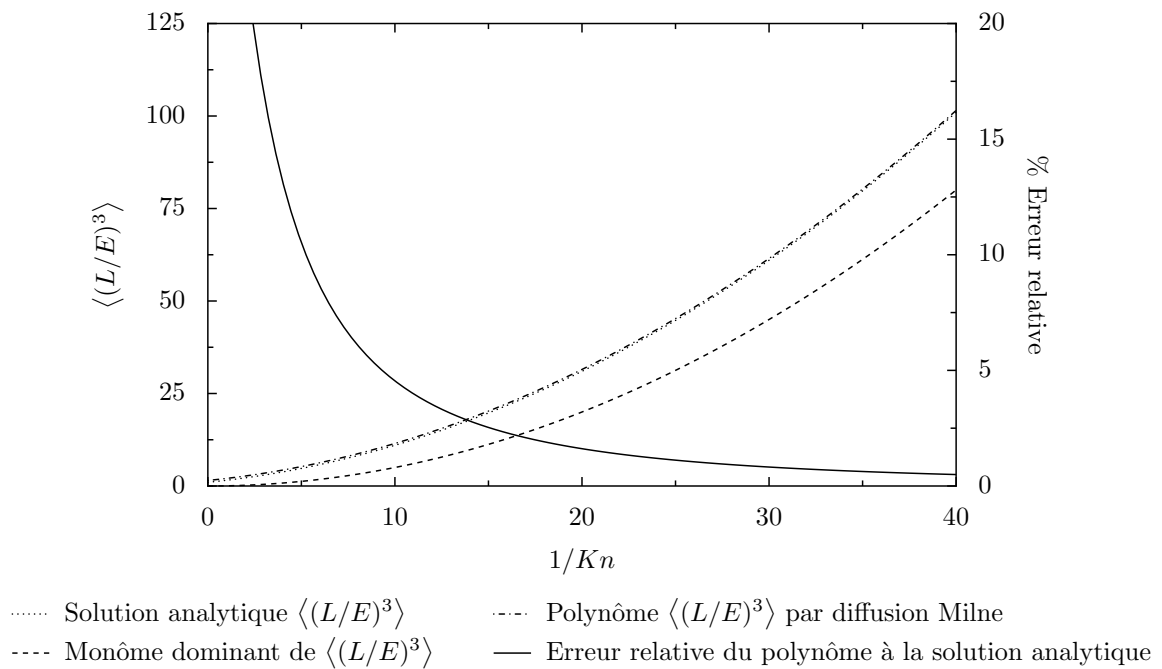


FIGURE 5.15.: Comportement du modèle pour la ligne : Moment d'ordre 3.

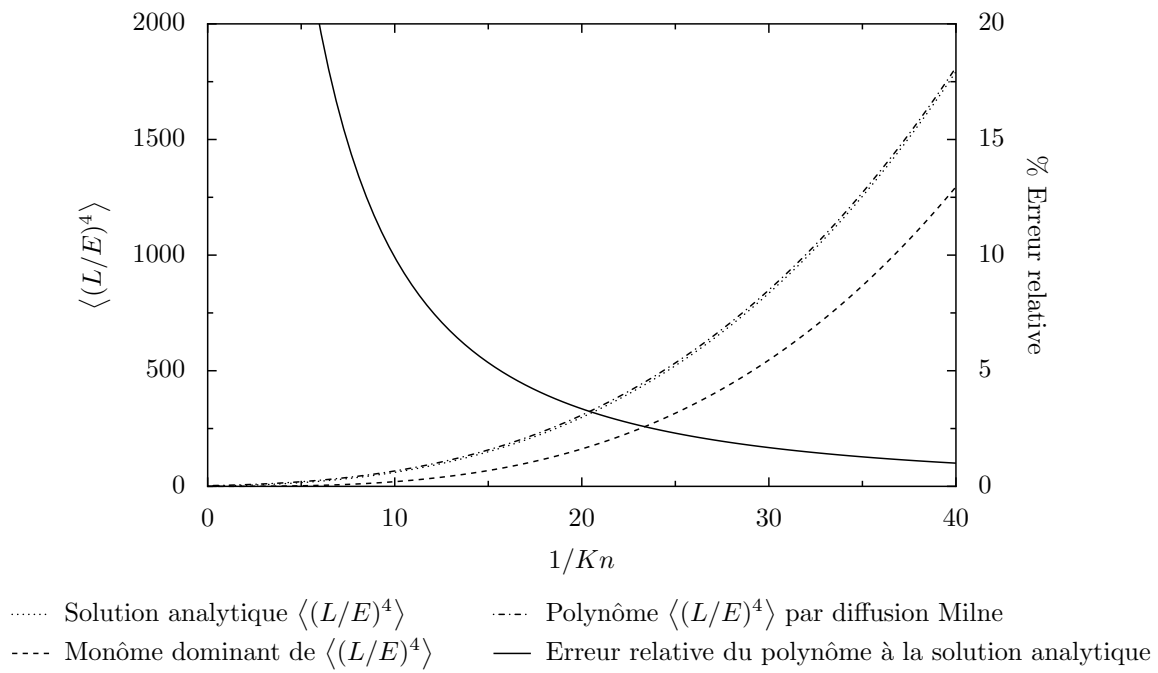


FIGURE 5.16.: Comportement du modèle pour la ligne : Moment d'ordre 4.

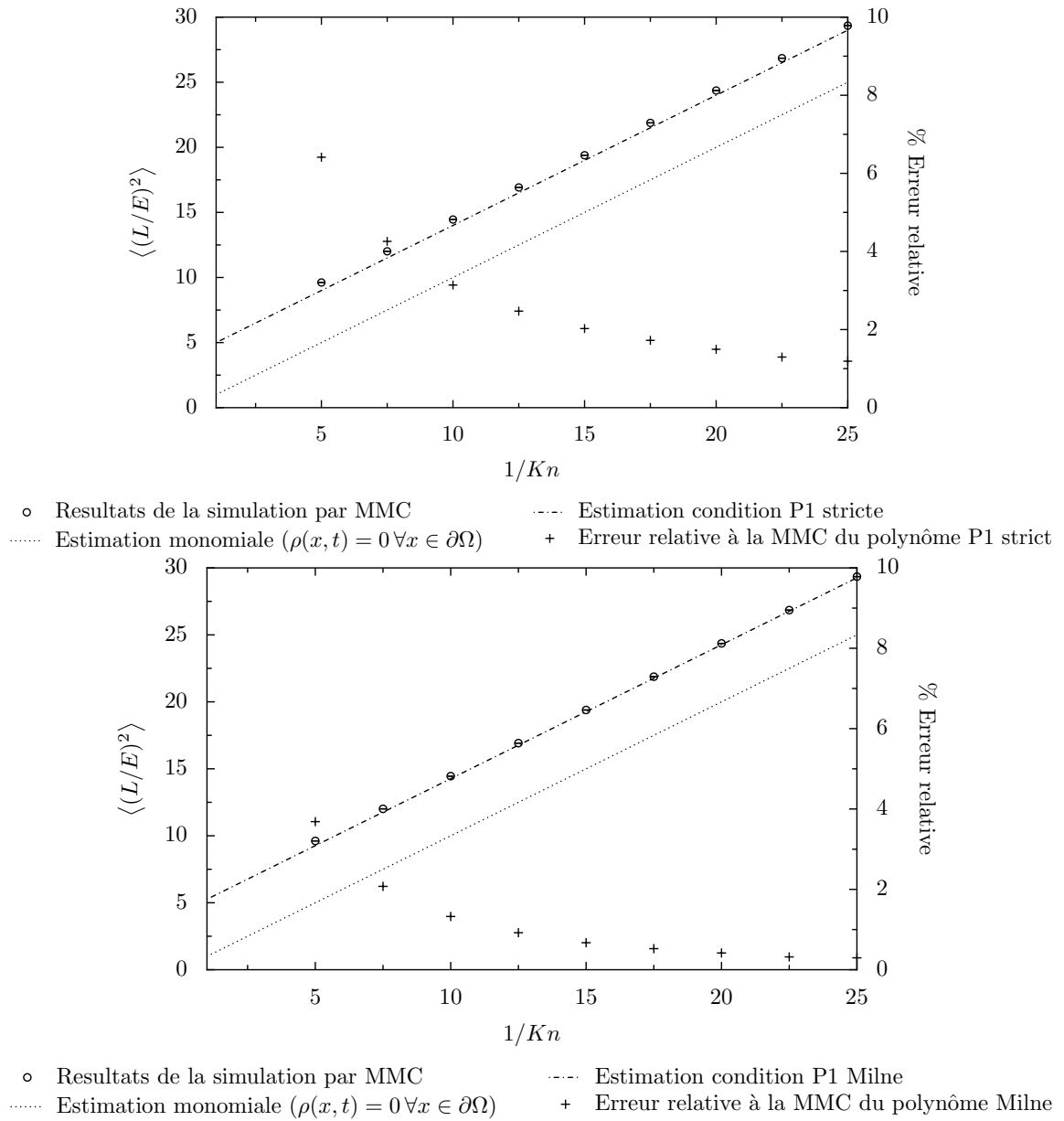


FIGURE 5.17.: Comportement du modèle pour le slab : Moment d'ordre 2. Condition P1 stricte (haut) et condition de Milne (bas).

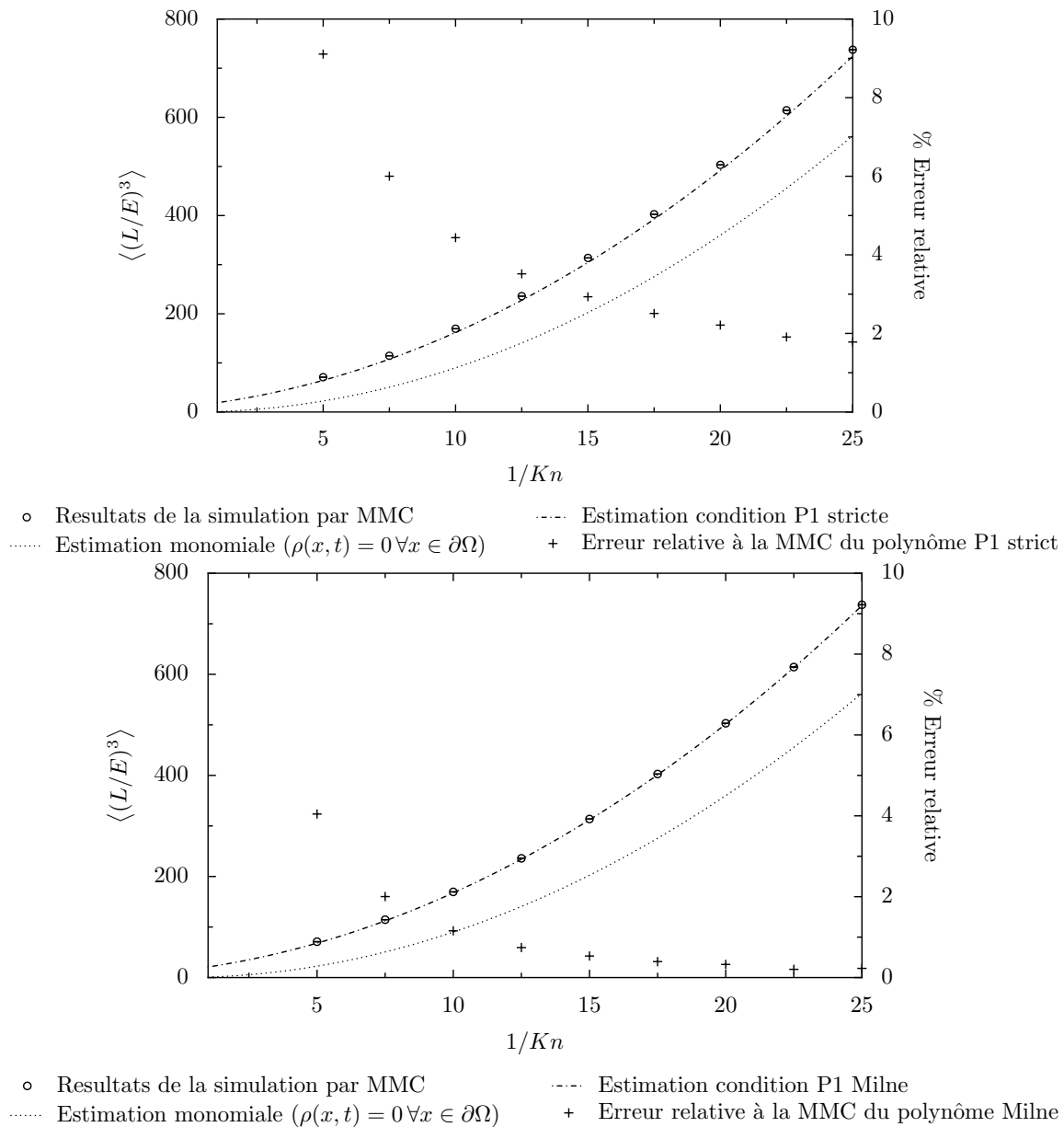


FIGURE 5.18.: Comportement du modèle pour le slab : Moment d'ordre 3. Condition P1 stricte (haut) et condition de Milne (bas).

Chapitre 6.

Vers des géométries plus réalistes

Une méthodologie permettant d'évaluer les moments de la longueur des chemins de premier retour a été développée dans le chapitre précédent. La démarche a été présentée en toute généralité, mais les questions associées à la mise en oeuvre n'ont été détaillées qu'en géométrie mono-dimensionnelle : Le cas mono-dimensionnel pur (une ligne) et le slab (deux plans parallèles infinis). Dans le cas du slab, le principal avantage de cette configuration est que nous disposons de solutions analytiques pour la résolution de l'équation de la diffusion macroscopique lorsque celle-ci se trouve associée de conditions aux limites de type Milne, ou lorsque l'on fixe des densités constantes à la frontière. Plus explicitement, la fonction de densité de probabilité des temps de résidence, calculée sous une approximation de diffusion, a une expression analytique. Le passage aux géométries tridimensionnelles va par contre nécessiter de résoudre numériquement cette équation de diffusion. Nous proposons, dans la première partie de ce chapitre, de commencer par tester la résolution numérique de l'équation de diffusion dans le cas du slab, pour lequel nous disposons en référence des solutions analytiques obtenues dans le chapitre précédent. Ceci nous permet de vérifier que le passage au numérique, en tant que tel (c'est à dire sans encore questionner la validité de notre modèle en géométrie tridimensionnel, notamment le choix de la condition aux limites de Milne), ne remet pas en cause la démarche décrite au chapitre précédent, notamment que les précisions nécessaires n'impliquent pas un maillage spatial et un maillage temporel exagérément raffinés, ou une plage d'intégration temporelle trop importante (les grandeurs recherchées étant des intégrales temporelles sur $[0, +\infty[$ une troncature temporelle doit en effet être introduite). À partir des informations que nous obtenons dans ce cas mono-dimensionnel, concernant le maillage spatial, le maillage temporel et la limite d'intégration temporelle, nous pouvons nous faire une première idée des puissances de calculs nécessaires pour atteindre une précision acceptable sur la statistique des longueurs de chemin de premier retour en géométrie tridimensionnelle.

Nous testons ensuite pratiquement la validité de notre modèle sur l'exemple tridimensionnel académique du cube, pour lequel la mise en oeuvre de la résolution numérique de l'équation de diffusion est aussi simple que pour le slab. Les résultats étant cette fois confrontés à des simulations de Monte-Carlo en l'absence de solution analytique. Là, nous testons à la fois l'effet du schéma numérique de résolution de l'équation de diffusion et la validité de notre choix de conditions aux limites en géo-

métrie tridimensionnelle. Au stade actuel, nous ne sommes pas allés plus loin dans le traitement de géométries tridimensionnelles. Les outils que nous avons développés en ce qui concerne la méthode de Monte-Carlo ont été pensés depuis le départ pour permettre le traitement de géométries complexes. L'outil de validation est donc prêt. Mais nous n'avons pour l'instant pas eu le temps de mettre en oeuvre les techniques de résolution numérique de l'équation de diffusion adaptées aux géométries complexes, assurant notamment un bon niveau de précision en instationnaire à partir de maillages non-structurés. Nous pensons en particulier aux méthodes numériques utilisées dans AVBP¹, code de calcul développé par le CERFACS² en collaboration avec l'IFP, qui résout les équations de conservation (espèces, masse, mouvement et énergie), compressibles tridimensionnelles, pour des maillages non-structurés, et qui a donc besoin d'une représentation précise des phénomènes diffusifs.

6.1. Mise en oeuvre numérique sur un cas mono-dimensionnel

Le but de cette partie est de montrer que la mise en oeuvre numérique de la méthodologie exposée dans la partie 5.4.3 amène un ordre de précision compatible avec les objectifs de nos travaux. Cette méthodologie ayant été appliquée avec succès dans le cas de la couche mono-dimensionnelle de façon analytique, nous allons ici comparer les résultats de la mise en oeuvre numérique à ces résultats analytiques (cf. tableau 5.6).

6.1.1. Évaluation du coefficient $\beta_{n-1,n}$

La première étape de la méthodologie est le calcul du coefficient du monôme dominant $\beta_{n-1,n}$. Ce coefficient est accessible par la résolution de l'équation de diffusion en imposant une condition de densité nulle au bord du domaine (cf. section 3.4). Cette résolution permet de tabuler la fonction $p_T^{diff}(\tau)$ entrant en jeu dans le calcul de $\beta_{n-1,n}$ ³ par la relation (3.16). Dans cette relation, nous sommes confrontés à une intégration temporelle de la fonction $p_T^{diff}(\tau)$ sur $[0, +\infty[$. Numériquement il faut donc définir un temps τ de fin de simulation correspondant à cet infini. Pour cela, nous considérons la masse totale restante dans le système définie comme $\int_{\Omega} \rho(z, \tau) dz = \int_{\Omega}^E \rho(z, \tau) dz$. Lorsque le rapport de la masse actuellement dans le système sur la masse totale initiale est inférieur à un palier donné m_{τ} , la simulation prend fin.

La méthode numérique utilisée est une méthode d'Euler avant de pas d'espace uniforme Δz et de pas de temps $\Delta \tau$. Des tests effectués sur cette dernière valeur ont montré qu'elle n'avait qu'une très faible influence sur le calcul, comme le montre le tableau 6.1. Le choix est effectué de fixer cette valeur à $\Delta \tau = 10^{-6}$, valeur suffisamment faible pour remplir le critère de stabilité de la méthode choisie pour tous les pas

1. A Very Big Problem
 2. <http://www.cerfacs.fr/avbp> & <http://www.cerfacs.fr/4-26334-The-AVBP-code.php>
 3. Rappelons que les coefficient α_n et $\beta_{n-1,n}$ sont reliés par la relation $\beta_{n-1,n} = \frac{\alpha_n}{E^{2n-1}}$ comme montré en 5.2

$\Delta\tau$	$\beta_{0,1}$	$\beta_{1,2}$	$\beta_{2,3}$
10^{-4}	1.98267	1.00002	0.89535
10^{-5}	1.99819	1.00003	0.895757
10^{-6}	1.99964	1.00003	0.895797
10^{-7}	1.99978	1.00003	0.895801
10^{-8}	1.9998	1.00003	0.895802

TABLE 6.1.: Influence du paramètre $\Delta\tau$ dans l'évaluation numérique des $\langle(L/E)^n\rangle$ dans une couche mono-dimensionnelle. Le critère de masse restante finale est fixé à 0.01%, le pas d'espace à 1/40.

d'espace envisagés dans ce chapitre tout en assurant un degré de précision des calculs adéquat.

Un pas d'espace $\Delta z = 1/40$ et un palier de masse restante fixé à 0.01% donnent des valeurs très proches des valeurs analytiques de la table 5.6. Ces valeurs numériques sont données dans le tableau 6.2.

n	1	2	3
$\beta_{n-1,n}$	1.999	1.00003	0.8958

TABLE 6.2.: Estimation des coefficients $\beta_{n-1,n}$ dans une couche mono-dimensionnelle par une résolution numérique de l'équation de diffusion avec condition de densité nulle à la paroi.

6.1.2. Évaluation numérique des coefficients polynomiaux

La méthode d'évaluation des coefficients polynomiaux repose sur la méthodologie proposée dans le paragraphe 5.4.2 pour l'évaluation de la fonction de distribution des temps de résidence $p_T^{diff}(t)$ à l'aide d'une résolution de l'équation de diffusion avec condition P1 corrigée par Milne. La suite de la méthodologie est classique : Une fois la fonction $p_T^{diff}(t)$ tabulée, on évalue la fonction $\langle(L/E)^n\rangle$ en n-1 valeurs du nombre de Knudsen pour estimer les n-1 coefficients polynomiaux $\beta_{i,n}$ des monômes d'ordre inférieur. Par rapport à la condition (5.34), nous avons ici $\chi = 1.0656$ pour respecter la condition de Milne, $\gamma = 2$ et $q = 3$ pour résoudre la diffusion en trois dimensions.

Ce système est lui aussi résolu avec une méthode d'Euler avant, les résultats pour divers paramètres Δz et m_r , pourcentage de masse restante par rapport à la masse initiale sont donnés dans la table 6.3.

On constate avec ces résultats que l'évaluation numérique permet de retrouver des coefficients très proches des solutions analytiques données dans la table 5.6. Ces résultats montrent de plus que le critère de masse restante est un facteur plus important

m_r	Δz	$\beta_{0,1}$	$\beta_{1,2}$	$\beta_{0,2}$	$\beta_{2,3}$	$\beta_{1,3}$	$\beta_{0,3}$
0.1	1/40	1.999	1.00003	3.937	0.8958	4.6002	30.71
0.1	1/80	1.999	1.00003	3.9839	0.8958	4.6674	30.092
0.05	1/40	1.999	1.00003	4.0567	0.8958	5.2956	24.074
0.05	1/80	1.999	1.00003	4.1036	0.8958	5.3628	23.459
0.01	1/40	1.999	1.00003	4.1658	0.8958	6.0198	17.159
0.005	1/40	1.999	1.0003	4.1817	0.8958	6.1142	14.104

TABLE 6.3.: Estimation numérique des coefficients $\beta_{i,n}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie. Les $\langle(L/E)^n\rangle$ sont évalués par résolution de l'équation de diffusion avec condition de type P1 Milne aux bords. Les résultats ont été obtenus pour des épaisseurs optiques de 25 et 20 lorsqu'une seconde évaluation a été nécessaire.

que le pas d'espace utilisé. Cette observation s'explique simplement par la forme de la fonction de densité de probabilité que l'on souhaite tabuler et son utilisation : La fonction a une forme de décroissance logarithmique et le critère de fin de simulation équivaut à une troncature des résultats dépassant le temps de vidange correspondant à m_r . Calculant l'espérance d'un polynôme, pour un temps limite de vidange donné, les résultats chutent de précision avec l'ordre n du polynôme croissant. Le critère de masse m_r doit ainsi être choisi de plus en plus faible selon l'ordre n étudié. Dans le cas le plus favorable $m_r = 5.10^{-3}\%$, on retrouve une valeur de $\beta_{0,2}$ d'erreur relative à l'analytique de 2,15% et de 3,5% pour $\beta_{0,3}$.

6.2. Application dans le cas d'une géométrie 3D : le cube

Dans cette partie nous allons appliquer la méthode développée en 5.4.3 et mise en oeuvre numériquement dans la partie précédente sur une géométrie plus complexe : le cube. Cet élément de base est à mettre en relation avec la notion de voxel permettant de discrétiser une géométrie complexe en trois dimensions dans le domaine de la synthèse d'image. Une mise en oeuvre concluante de cette méthode sur un simple cube ouvre la porte à la modélisation de géométries plus bien plus complexes. En outre, le cube contient toute la complexité d'information physique d'une situation à trois dimensions : La diffusion s'effectue en trois dimensions et le flux de diffusion ne présente pas de direction dominante permettant de simplification (au contraire de la couche mono-dimensionnelle infinie).

Nous allons en premier lieu établir la solution de référence par la construction du polynôme représentant au mieux les résultats bruts de simulations par méthode de

Monte-Carlo pour les moments d'ordre 2 et 3. Une résolution de l'équation de diffusion avec condition de densité nulle au bord est ensuite effectuée pour l'évaluation du terme $\beta_{n-1,n}$. Enfin, la même équation avec une condition aux bords de type P1 Milne est résolue pour calculer $\langle(L/E)^2\rangle$ et $\langle(L/E)^3\rangle$ et évaluer les coefficients polynomiaux restants. Nous effectuerons pour finir une comparaison des résultats et montrerons que cette dernière méthodologie est une alternative aussi précise que la simulation par MMC avec un coups de mise en oeuvre moindre.

6.2.1. Construction numérique sur la base de simulation par la MMC

La méthode décrite dans 5.3 est utilisée dans une géométrie à trois dimensions : le cube. Ne disposant pas de solution analytique de l'ETR sous l'approximation de diffusion (équation de diffusion), une résolution numérique est nécessaire pour le calcul du terme dominant de l'expression polynomiale $\beta_{n-1,n}$. Les termes suivants seront évalués à partir des simulations numériques par la méthode de Monte-Carlo de $\langle L^n \rangle$ et de sa sensibilité d'ordre un par rapport à l'épaisseur optique de diffusion.

Évaluation du coefficient $\beta_{n-1,n}$

Le coefficient du terme dominant de $\langle L^n \rangle$ est évalué selon la méthodologie décrite dans [5]. Le terme $p_T^{diff}(\tau)$, fonction densité de probabilité des temps de résidence dans le cube, est exprimé en fonction du flux normalisé de particules sortant de la géométrie en respect à l'équation (3.18). Le système d'équation régissant l'évolution de la densité de particules dans le cube est le suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau}(x, y, z, \tau) = D\Delta\rho(x, y, z, \tau) \quad (6.1)$$

avec les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \rho(x, y, z, 0) = 1/V & \forall (x, y, z) \in \Omega \\ \rho(x, y, z, \tau) = 0 & \forall (x, y, z) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (6.2)$$

où Ω désigne le cube de frontière $\partial\Omega$ et de volume V et $\tau = Dt$ avec $D = \frac{c l_s}{q}$ coefficient macroscopique de diffusion.

Comme pour le cas précédent, le système est résolu par une méthode d'Euler avant de pas d'espace uniforme $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \frac{1}{40}$ et de pas de temps $\Delta\tau = 10^{-6}$ dans un cube d'arête unité. La simulation prend fin lorsque la masse $\int_{\Omega} \rho(x, y, z, \tau) dx dy dz$ restante dans le cube est inférieur à 1% de la masse initialement distribuée (de valeur 1 selon les notations utilisées ci-dessus).

La simulation numérique permet de tabuler les valeurs de $p_T^{diff}(\tau)$ permettant ensuite les calculs de tous les $\beta_{n-1,n}$ définis par la relation (3.16)⁴ par intégration numérique. Les valeurs des $\beta_{n-1,n}$ obtenues pour les trois premiers moments de $\langle L^n \rangle$ sont regroupées dans le tableau de synthèse 6.4.

4. Rappelons que $\beta_{n-1,n} = \frac{\alpha_n}{E^{2n-1}}$, cf. 5.2

Évaluation numérique des coefficients polynomiaux

La méthodologie utilisée dans le cas de la couche mono-dimensionnelle infinie décrite dans 5.3 est réutilisée à l'identique à partir de maintenant pour l'évaluation des coefficients suivants de l'expression polynomiale. Les simulations par méthode de Monte-Carlo sont effectuées avec 10^9 générations aléatoires.

Les résultats sont regroupés dans la table 6.4.

n	$\beta_{0,n}$	$\sigma_{\beta_{0,n}}$	$\beta_{1,n}$	$\sigma_{\beta_{1,n}}$	$\beta_{2,n}$	$\sigma_{\beta_{2,n}}$
1	$\frac{2}{3}$	0				
2	0.600139 ₍₃₀₎	0.000592267	0.0800107	0		
3	0.5699 ₍₃₀₎	0.0691	0.2716 ₍₃₀₎	0.00972753	0.0214332	0

TABLE 6.4.: Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ à partir des simulations de Monte-Carlo à 10^9 tirages dans un cube. L'épaisseur optique de diffusion ($\frac{1}{Kn}$) utilisée pour chaque estimation est indiquée entre parenthèses.

6.2.2. Construction numérique par la diffusion Milne

Méthode

Contrairement à la situation mono-dimensionnelle infinie, l'approximation de diffusion avec condition de Milne ne peut être résolue analytiquement dans le cas d'un cube. La démarche numérique précédemment validée sur la couche mono-dimensionnelle infinie est utilisée ici : Une résolution de l'équation de diffusion avec condition P1 de type Milne est utilisée pour tabuler la fonction $p_T^{diff}(t)$ et permettre l'évaluation de $\langle L^n \rangle$. Les coefficients $\beta_{n-1,n}$ des termes dominants sont issus de la même résolution de l'équation de diffusion avec condition de densité nulle au bord que pour l'obtention de la référence dans le paragraphe précédent, leurs valeurs sont indiquées dans la table 6.4. Les coefficients suivants de l'expression polynomiale sont ensuite calculés successivement.

Le problème de diffusion avec condition P1 de type Milne s'exprime par le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, y, z, t) = D \Delta \rho(x, y, z, t) \quad (6.3)$$

avec les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \rho(x, y, z, 0) = 1/V & \forall (x, y, z) \in \Omega \\ \rho(x, y, z, t) + h \nabla \rho(x, y, z, t) \cdot \mathbf{n} = 0 & \forall (x, y, z) \in \partial \Omega \end{cases} \quad (6.4)$$

où $\nabla \rho(x, y, z, t)$ est une grandeur vectorielle représentant l'opérateur gradient appliqué à $\rho(x, y, z, t)$, \mathbf{n} le vecteur normal sortant à la paroi, $D = \frac{cl_s}{q}$ le coefficient de diffusion macroscopique et $h = (\chi\gamma) \frac{l_s}{q}$ un paramètre reprenant les notations de

l'équation (5.34) dans le cas d'une diffusion isotrope. Enfin, nous fixons $\chi = 1.0656$ pour respecter la condition de Milne, $\gamma = 2$ et $q = 3$ pour respecter la diffusion en trois dimensions dans un géométrie en trois dimensions.

Ce système est lui aussi résolu avec une méthode d'Euler avant de paramètres identiques à ceux de résolutions de (6.1).

Résultats

Les coefficients obtenus sont regroupés dans la table 6.5.

n	$\tilde{\beta}_{0,n}$	$\tilde{\beta}_{1,n}$	$\tilde{\beta}_{2,n}$
1	$\frac{2}{3}$		
2	0.5298025	0.0800107	
3	0.6575	0.205255	0.021433

TABLE 6.5.: Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ dans un cube. Les grandeurs $\langle(L/E)^n\rangle$ sont évaluées par résolution de l'équation de diffusion avec condition de type P1 Milne aux bords. Les résultats ont été obtenus pour des épaisseurs optiques de 25 et 20 lorsqu'une seconde évaluation a été nécessaire.

6.2.3. Comparatif des différentes méthodes d'évaluation

Les graphes 6.1 et 6.2 comparent les résultats des différentes évaluations des moments d'ordre 2 et 3 de $\langle(L/E)^n\rangle$ par la méthode de Monte-Carlo, le monôme issu de [5], le polynôme reconstruit sur les résultats de la MMC et le polynôme reconstruit sur les résultats de l'équation de diffusion avec condition de type P1 Milne.

La méthode de construction des polynômes à partir d'une résolution de l'équation de diffusion avec une condition de type P1 Milne conserve le degré de précision mis en évidence dans le chapitre 5. Les graphes 6.3 et 6.4 représentent les erreurs relatives aux résultats bruts de simulations MMC sur $\langle(L/E)^2\rangle$ et $\langle(L/E)^3\rangle$ des deux méthodes d'évaluations des polynômes : L'expression polynomiale reconstruite par rapport aux résultats de la MMC et l'expression polynomiale reconstruite par rapport aux résultats de la diffusion Milne. Ces graphes montrent un ordre de grandeur de la précision identique entre les deux méthodes d'évaluations. Il faut cependant garder en mémoire que le polynôme reconstruit sur les résultats MMC utilise les résultats de la simulation à une épaisseur optique de 30. La convergence des résultats de cette évaluation dépend fortement de l'épaisseur optique choisie pour cette construction.

Le principal gain de la formulation par résolution de l'équation de diffusion avec condition de bords de type Milne se trouve dans la mise en oeuvre pratique de la méthodologie : La précision d'une simulation par une méthode de Monte-Carlo à 10^9 générations aléatoires d'une durée totale de 145 heures est atteinte grâce à une

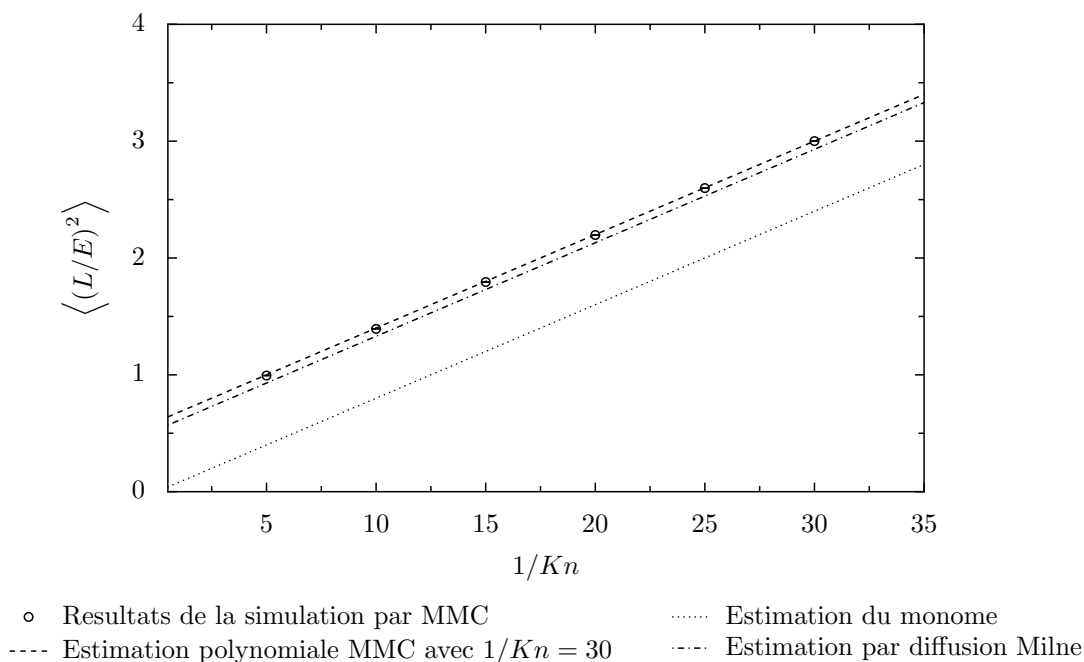


FIGURE 6.1.: Comparaison des différentes méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ dans un cube.

résolution d'une équation de la chaleur avec un schéma d'Euler d'une durée d'1h45⁵

6.3. Conclusion

Nous avons montré dans le cas tridimensionnel du cube que la méthodologie proposée pour traiter des milieux très diffusants donne de très bons résultats en géométrie tridimensionnelle.

Comme nous l'avons souligné en introduction de ce chapitre, la généralisation à des géométries quelconques nécessitera de disposer de codes de calcul utilisant des méthodes numériques avancées afin d'obtenir des bons niveaux de précision dans la résolution instationnaire de l'équation de diffusion en maillage non structuré. En revanche, pour résoudre l'équation de transfert radiatif sur de telles géométries, c'est à dire pour produire les solutions de référence, les outils développés par l'équipe dans le cadre du développement des méthodes de Monte-Carlo ne posent pas de problèmes. En effet, l'utilisation des résultats de recherche du domaine de la synthèse d'images, dont on a fait mention à la fin du chapitre 4, permet de disposer de techniques de calcul efficaces pour effectuer les opérations de calculs d'intersection entre les chemins optiques de multi-diffusion et le très grand nombre d'objets maillés constituant la scène. Pour at-

5. Les durées indiquées prennent en compte les évaluations de $\langle L^1 \rangle, \langle L^2 \rangle, \langle L^3 \rangle$ et leur dérivée respective par rapport à l'épaisseur optique de diffusion dans le cas des simulations de Monte-Carlo. La résolution de l'équation de diffusion quant à elle est effectuée une unique fois afin de tabuler la fonction de densité de probabilité $p_T^{\text{diff}}(t)$, les évaluations des $\langle L^n \rangle$ sont ensuite quasi immédiates.

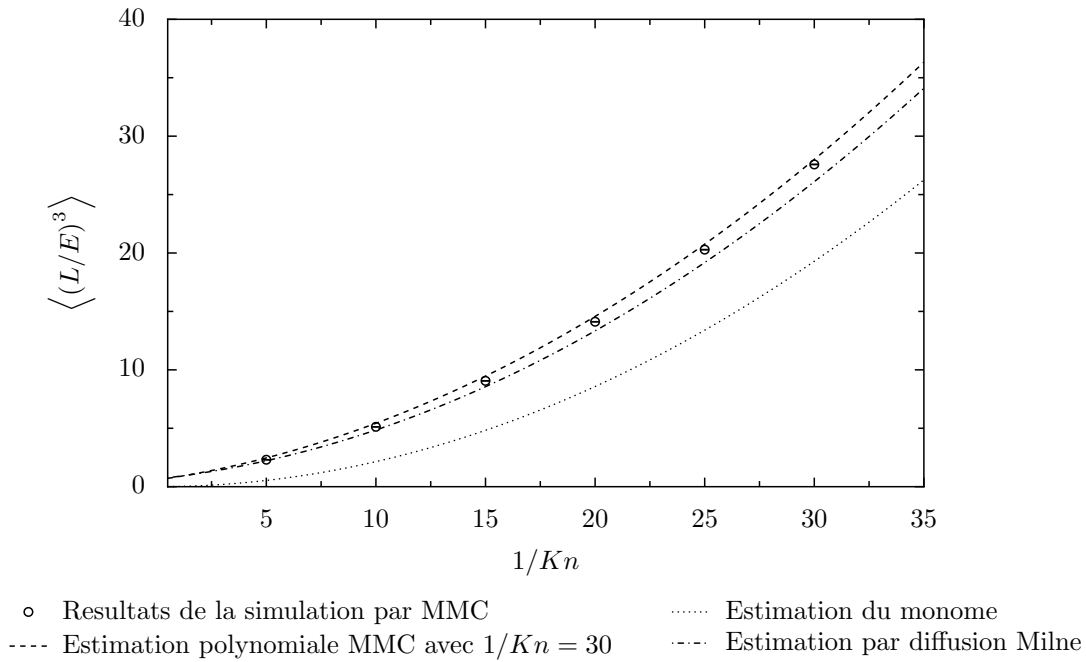
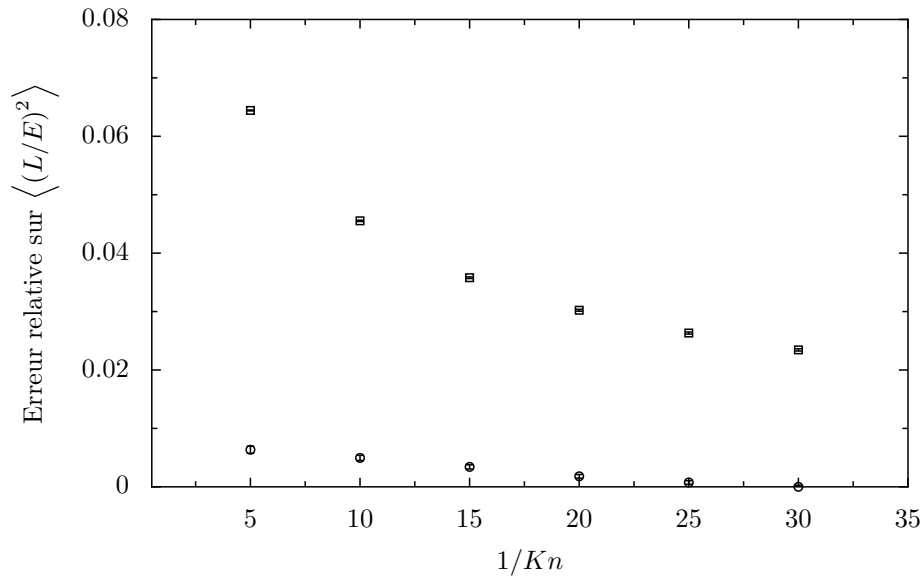


FIGURE 6.2.: Comparaison des différentes méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ dans un cube.

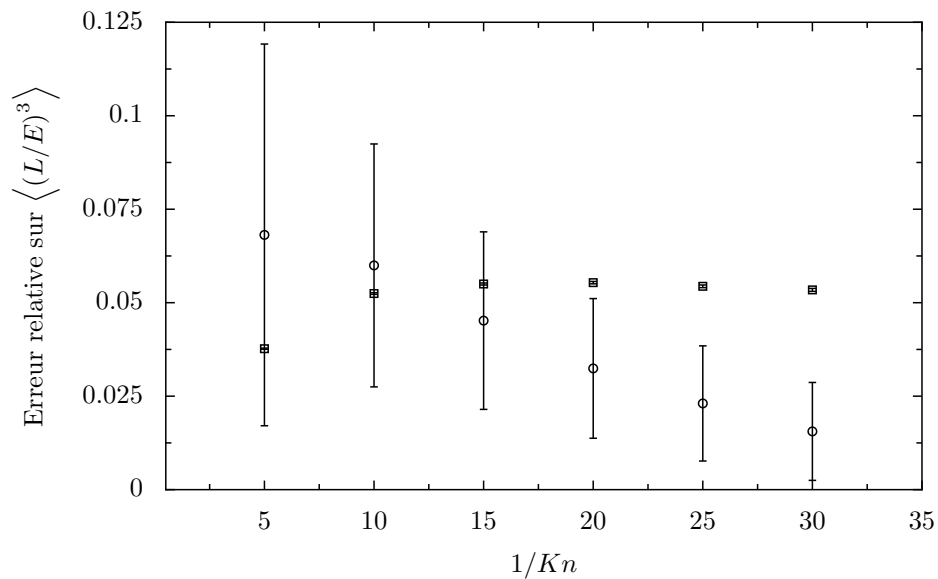
teindre l'objectif que nous nous sommes donné, il ne nous reste donc plus qu'à mettre en oeuvre avec rigueur les méthodes de résolution numérique disponibles concernant la résolution instationnaire de l'équation de diffusion.

On peut mentionner que pour le calcul de grandeurs intégrées sur l'ensemble des longueurs, tel que les moments ou l'absorption sur l'ensemble des trajets optiques, il est toujours possible de ramener le problème à la résolution d'un jeu d'équations de diffusion stationnaire couplés, comme nous l'avons montré dans l'annexe A pour le système plans parallèles. Il peut en resulter une résolution numérique plus simple, voir analytique dans certains cas symétriques et dans tout les cas la disparition du problème de la troncature en temps.



○ Polynôme reconstruit par MMC a $1/Kn = 30$ □ Polynôme reconstruit avec diffusion Milne

FIGURE 6.3.: Comparaison de deux méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ dans un cube à l'aide de leurs erreurs relatives respectives à des simulations de Monte-Carlo directe de $\langle (L/E)^2 \rangle$ à 10^9 générations aléatoires.



○ Polynôme reconstruit par MMC a $1/Kn = 30$ □ Polynôme reconstruit avec diffusion Milne

FIGURE 6.4.: Comparaison de deux méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ dans un cube à l'aide de leurs erreurs relatives respectives à des simulations de Monte-Carlo directe de $\langle (L/E)^3 \rangle$ à 10^9 générations aléatoires.

Chapitre 7.

Conclusion et perspectives

Le travail présenté ici est centré sur la proposition d'une méthodologie permettant la description statistique du comportement des chemins de premier retour caractérisés par l'évaluation des moments de la longueur de ces chemins lorsque le nombre de Knudsen n'est plus voisin de zéro. La méthodologie s'appuie sur un formalisme théorique mettant à contribution le lien entre les chemins de premier retour et ceux de premiers passage. Le problème est alors réduit à la proposition d'une formulation adéquate des conditions initiales dans la résolution de l'équation de diffusion. La mise en pratique de ce modèle a été étudiée et confrontée à des solutions de références obtenues par méthode de Monte-Carlo.

La méthode d'obtention de ces résultats de référence a elle-même fait l'objet d'une présentation détaillée et met en évidence la nécessité d'une modélisation dont l'application en terme de simulation numérique soit rapide tout en conservant un grand degré de précision. La modélisation proposée, mise en oeuvre numériquement sur des cas où la géométrie spatiale est simple, montre que ces deux objectifs sont atteints : La précision est semblable à la solution de référence et le gain en temps de simulation est notable. L'application numérique du modèle ne nécessite maintenant plus qu'un code de résolution instationnaire et en maillage non structuré de l'équation de diffusion pour être confrontée à des situations concrètes. La recherche ou le développement de ce code, son application au modèle proposé et les difficultés afférentes de mise en oeuvre dépassent le cadre de ce travail. Cependant, cette finalité ayant été prise en compte, un soin particulier a été apporté à l'élaboration de l'outil fournissant les solutions de référence par méthode de Monte-Carlo afin d'être complet et pleinement opérationnel sur ces géométries.

Il convient cependant de garder en mémoire le fait que le travail de thèse qui a été présenté correspond à un cadre restreint : nous avons proposé une méthodologie de calcul des moments d'ordre n de la longueur des chemins de premier retour dans un domaine dont la frontière est éclairée uniformément et de manière isotrope. Que se passe-t-il quand l'une ou l'autre condition n'est pas vérifiée ?

Cette question est légitime car dans les applications médicales, l'éclairage n'est pas uniforme. On utilise au contraire la non-uniformité et la non-isotropie de l'éclairage pour tenter d'accumuler le plus d'information possible sur la composition du milieu que l'on prétend sonder. Les deux conditions qui auront été au centre de notre travail

ne sont donc pas vérifiées. Il y a cependant deux raisons qui nous ont poussé à nous concentrer sur ce cas particulier, malgré les objectifs plus larges associés à l'imagerie médicale :

- D'une part, c'est à partir de l'équilibre qu'ont pu être identifiées les propriétés dont nous avons parlé, notamment l'invariance de la moyenne des longueurs des chemins de premier retour. Il y a donc indubitablement beaucoup à apprendre à poursuivre l'analyse des chemins de premier retour tels que nous les avons définis, du fait même de leur lien avec l'équilibre : Nous sommes là dans des conditions privilégiées pour tenter de comprendre ce que signifie la possibilité de remplacer un problème de premier retour par un problème de premier passage, et d'en explorer les conséquences en termes de modèles approchés.
- D'autre part, des travaux non publiés menés dans l'équipe, notamment par Stéphane Blanco, montrent qu'il est possible d'étendre les travaux de [5] à des configurations où l'éclairage reste isotrope, mais n'est plus uniforme. Cela revient à fabriquer un nouveau problème de type R en introduisant des conditions initiales adéquates. Des tests sur le cas du slab ont été effectués pour étudier le cas où l'on éclaire que d'un côté (donc la condition uniforme n'est plus valable) : Il apparaît que les résultats de [5] s'étendent directement et il y a donc de bonnes raisons de penser que les nouvelles propositions faites dans cette thèse s'étendront également.

Pour les cas où l'isotropie n'est pas vérifiée, il reste à fabriquer un nouveau problème de type R avec cette fois ci à la fois de nouvelles conditions initiales et de nouvelles conditions limites à la frontière, probablement dans le même esprit que ce que nous avons décrits en 2.2.2 concernant la séparation du rayonnement direct (n'ayant vécu aucune diffusion) et et du rayonnement diffus (ayant vécu au moins une diffusion). L'ensemble des pistes que nous mentionnons ici concernant les éclairages non-uniformes et non-isotropes correspondent à des travaux non encore publiés, extérieurs à la présente thèse, dont nous ne pouvons pas donner tous les détails.

Annexe A.

Résolution de l'équation de la chaleur avec condition P1

A.1. Mise en équation

Rappelons que l'équation (3.12) relie les moments de premier retour aux moments de premier passage. Ces moments de premier retour ont, d'après (3.13) et (3.18), l'expression générale suivante :

$$\langle (R^{diff})^n \rangle = \int_0^{+\infty} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho|_{\mathbf{y},\tau} d\mathbf{y} r^n dr \quad (\text{A.1})$$

Lorsque l'on souhaite appliquer une condition P1 à la paroi, l'évolution de $\rho(\mathbf{x}, \tau)$ est régie par le système (5.31) aux conditions (5.33) et (5.34).

Dans un problème de diffusion mono-dimensionnel le long d'une ligne ou dans une couche mono-dimensionnelle avec une distribution initiale symétrique, les flux sortants par l'une ou l'autre des frontières ont une expression identique. On peut alors écrire (A.1) sous la forme :

$$\langle (R^{diff})^n \rangle = \frac{2}{\rho_0 E} \int_0^{+\infty} \frac{v l_s}{q} \frac{q}{\chi \gamma l_s} \rho(0, t) (tv)^n dt \quad (\text{A.2})$$

où le coefficient de diffusion macroscopique D a été remplacé par son expression $\frac{v l_s}{q}$.

On fait le choix maintenant d'introduire la fonction $Z_n(x, t)$ suivante :

$$Z_n(x, t) = \int_0^t \rho(x, t') t'^n dt' \quad (\text{A.3})$$

Cette fonction a la particularité dans un problème stationnaire¹ d'être reliée aisément à l'expression (A.2) :

$$\langle (R^{diff})^n \rangle = \frac{2}{\rho_0 E} \frac{v^{n+1}}{\chi \gamma} Z_n^{\text{stat}}(0) \quad (\text{A.4})$$

où la fonction $Z_n^{\text{stat}}(x)$ est définie ainsi :

$$\begin{aligned} Z_n^{\text{stat}}(x) &= Z_n(x, t = +\infty) \\ &= \int_0^{+\infty} \rho(x, t') t'^n dt' \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

1. La dépendance à la variable t n'est plus mentionnée pour les grandeurs stationnaires.

De par la définition (A.3) et le système d'équations en $\rho(x, t)$ (5.31) aux conditions (5.34), on peut écrire le système correspondant en $Z_n(x, t)$ ($n \geq 1$)² :

$$\frac{\partial Z_n}{\partial t}(x, t) - D \frac{\partial^2 Z_n}{\partial x^2}(x, t) = n Z_{n-1}(x, t) \quad (\text{A.6})$$

La seule évolution stationnaire nous intéressant, le système suivant est le seul ayant une utilité par la suite :

$$D \frac{\partial^2 Z_n^{\text{stat}}}{\partial x^2}(x) = -n Z_{n-1}^{\text{stat}}(x) \quad (\text{A.7})$$

Par définition, en $t = 0$ on a la condition initiale $Z_n(x, 0) = Z_n^{\text{stat}}(x) = 0$; les conditions aux limites de ce système sont quant à elles :

$$\begin{cases} Z_n^{\text{stat}}(0) - (\chi\gamma) \frac{l_s}{q} \frac{\partial Z_n^{\text{stat}}}{\partial x}(0) = 0 \\ Z_n^{\text{stat}}(E) + (\chi\gamma) \frac{l_s}{q} \frac{\partial Z_n^{\text{stat}}}{\partial x}(E) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

On remarque que pour chaque ordre n , le système requiert pour sa résolution la connaissance de la solution à l'ordre $n - 1$. Nous avons donc une définition récursive des moments d'ordre n de R et donc de L .

A.2. Résolution pour l'évaluation de $\langle L^3 \rangle$

A titre d'exemple de mise en oeuvre, nous allons maintenant appliquer cette méthode dans le cadre de l'évaluation de $\langle L^3 \rangle$. D'après (3.12) et (A.4), nous avons :

$$\langle L^3 \rangle = 3 \langle L \rangle \frac{2}{\rho_0 E} \frac{v^3}{\chi\gamma} Z_2^{\text{stat}}(0) \quad (\text{A.9})$$

Cette solution nécessite la connaissance du terme $Z_2^{\text{stat}}(0)$, qui d'après la relation (A.7) nécessite lui même la résolution du système pour $Z_1^{\text{stat}}(0)$ et donc $Z_0^{\text{stat}}(0)$. Nous traitons donc en premier lieu ce dernier terme, solution de :

$$D \frac{\partial^2 Z_0^{\text{stat}}}{\partial x^2}(x) = -\rho_0 \quad (\text{A.10})$$

aux conditions aux limites :

$$\begin{cases} Z_0^{\text{stat}}(0) - (\chi\gamma) \frac{l_s}{q} \frac{\partial Z_0^{\text{stat}}}{\partial x}(0) = 0 \\ Z_0^{\text{stat}}(E) + (\chi\gamma) \frac{l_s}{q} \frac{\partial Z_0^{\text{stat}}}{\partial x}(E) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Ce système est obtenu à l'aide du système de fonction $Z_0(x, t)$ écrit par intégrations du système (5.31) aux conditions (5.34) et de l'usage de la stationnarité $\frac{\partial Z_n^{\text{stat}}}{\partial t}(x) = 0$. D'après (A.10), l'expression de $Z_0^{\text{stat}}(x)$ est un polynôme d'ordre 2 en x dont les deux

2. La fonction $Z_0(x, t)$ a un comportement particulier. Son équation est donnée dans la partie suivante.

coefficients inconnus sont définis par les conditions aux limites (A.11). La solution est alors :

$$Z_0^{\text{stat}}(x) = -\frac{\rho_0}{2D}x^2 + \frac{\rho_0 E}{2D}x + \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E}{2qD} \quad (\text{A.12})$$

Cette solution est ensuite utilisée dans le système pour $n = 1$:

$$D \frac{\partial^2 Z_1^{\text{stat}}}{\partial x^2}(x) = \frac{\rho_0}{2D}x^2 - \frac{\rho_0 E}{2D}x - \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E}{2qD} \quad (\text{A.13})$$

La solution de cette équation est là encore un polynôme, de degré 4, totalement défini par la donnée des conditions aux limites :

$$\begin{cases} Z_1^{\text{stat}}(0) - (\chi \gamma) \frac{l_s}{q} \frac{\partial Z_1^{\text{stat}}}{\partial x}(0) = 0 \\ Z_1^{\text{stat}}(E) + (\chi \gamma) \frac{l_s}{q} \frac{\partial Z_1^{\text{stat}}}{\partial x}(E) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

La solution complète de ce système est :

$$\begin{aligned} Z_1^{\text{stat}}(x) = & \frac{\rho_0}{24D^2}x^4 - \frac{\rho_0 E}{12D^2}x^3 - \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E}{4qD^2}x^2 + \\ & \left[\frac{\rho_0 E^3}{24D^2} + \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E^2}{4qD^2} \right] x + \left[\frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E^3}{24qD^2} + \frac{\rho_0 \chi^2 \gamma^2 l_s^2 E^2}{4q^2 D^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Enfin, le même principe est appliqué pour $n = 2$ donnant une solution pour $Z_2^{\text{stat}}(x)$:

$$\begin{aligned} Z_2^{\text{stat}}(x) = & -\frac{\rho_0}{360D^3}x^6 + \frac{\rho_0 E}{120D^3}x^5 + \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E}{24qD^3}x^4 - \\ & \left[\frac{\rho_0 E^3}{72D^3} + \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E^2}{12qD^3} \right] x^3 - \\ & \left[\frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E^3}{24qD^3} + \frac{\rho_0 \chi^2 \gamma^2 l_s^2 E^2}{4q^2 D^3} \right] x^2 + \\ & \left[\frac{\rho_0 E^5}{120D^3} + \frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E^4}{12qD^3} + \frac{\rho_0 \chi^2 \gamma^2 l_s^2 E^3}{4q^2 D^3} \right] x + \\ & \left[\frac{\rho_0 \chi \gamma l_s E^5}{120qD^3} + \frac{\rho_0 \chi^2 \gamma^2 l_s^2 E^4}{12q^2 D^3} + \frac{\rho_0 \chi^3 \gamma^3 l_s^3 E^3}{4q^3 D^3} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Ce qui pris en $x = 0$, nous donne la solution suivante :

$$\begin{aligned} Z_2^{\text{stat}}(0) = & \frac{\rho_0 \chi \gamma E^5}{120qD^3} l_s + \frac{\rho_0 \chi^2 \gamma^2 E^4}{12q^2 D^3} l_s^2 + \frac{\rho_0 \chi^3 \gamma^3 E^3}{4q^3 D^3} l_s^3 \\ = & \frac{\rho_0 \chi \gamma E^5 q^2}{120v^3} \frac{1}{l_s^2} + \frac{\rho_0 \chi^2 \gamma^2 E^4 q}{12v^3} \frac{1}{l_s} + \frac{\rho_0 \chi^3 \gamma^3 E^3}{4v^3} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Nous permettant d'écrire finalement la solution pour $\langle (L/E)^3 \rangle$:

$$\langle (L/E)^3 \rangle = \langle L \rangle \left[\frac{q^2 E}{20} \frac{1}{l_s^2} + \frac{\chi \gamma q}{2} \frac{1}{l_s} + \frac{3\chi^2 \gamma^2}{2E} \right] \quad (\text{A.18})$$

Dans le cas de la diffusion le long d'une ligne de longueur E , les paramètres sont :

- Un invariant $\langle L \rangle = E$;
- Une dimension de diffusion $q = 1$;
- Un paramètre $\gamma = 1$ (cf. tableau 5.4).

Nous obtenons pour une condition P1 stricte ($\chi = 1$) :

$$\langle (L/E)^3 \rangle_{\text{ligne}} = \frac{1}{20} \frac{E^2}{l_s^2} + \frac{1}{2} \frac{E}{l_s} + \frac{3}{2} \quad (\text{A.19})$$

Ce résultat ³ est bien celui indiqué dans la table 5.5.

Dans le cas de la diffusion dans une couche mono-dimensionnelle infinie d'épaisseur E , les paramètres sont :

- Un invariant $\langle L \rangle = 2E$;
- Une dimension de diffusion $q = 3$;
- Un paramètre $\gamma = 2$ (cf. tableau 5.4).

Nous obtenons pour une condition P1 stricte ($\chi = 1$) ou corrigée par le problème de Milne ($\chi = 1.0656$) :

$$\langle (L/E)^3 \rangle_{\text{slab}} = \frac{9}{10} \frac{E^2}{l_s^2} + 6\chi \frac{E}{l_s} + 12\chi^2 \quad (\text{A.20})$$

La table A.1 donne les coefficients pour les 4 premiers moments dans une couche mono-dimensionnelle.

n	$\widetilde{\beta}_{0,n}$	$\widetilde{\beta}_{1,n}$	$\widetilde{\beta}_{2,n}$	$\widetilde{\beta}_{3,n}$
1	2			
2	4χ	1		
3	$12\chi^2$	6χ	$\frac{9}{10}$	
4	$48\chi^3$	$36\chi^2$	$\frac{51}{5}\chi$	$\frac{153}{140}$

TABLE A.1.: Résultats de l'expression polynomiale en $1/K_n$ de $\langle (L/E)^n \rangle$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie avec traitement de la statistique des temps de résidence par une approximation de diffusion avec condition de bord P1. Le paramètre χ permet de différencier une condition P1 stricte ($\chi = 1$) d'une condition de Milne ($\chi = 1.0656$).

3. Rappelons que $\frac{1}{K_n} = u = k_s E = \frac{E}{l_s}$.

Table des figures

2.1.	Quantification des niveaux d'énergie d'une molécule.	9
2.2.	Émission et absorption de photons par une molécule.	10
2.3.	Interactions de diffusion de photons par une particule.	11
2.4.	Régime de diffusion en fonction du paramètre de taille et de la fraction volumique (tiré de [36]).	12
2.5.	Diffusion d'un flux de photon traversant une distribution homogène de particules.	13
2.6.	Détails des contributions des termes de l'ETR avec notations.	20
2.7.	Décomposition de la luminance en luminance incidente réduite L_{ri} et luminance diffuse L_d	21
2.8.	Solution de diffusion au premier ordre dans le cas d'épaisseur optique faible.	24
2.9.	Erreur relative de l'évaluation du temps de sortie d'un dirac suivant une modélisation par approximation de diffusion	35
3.1.	Trajectoires de diffusion multiple sur un plan entre deux points A et B de la frontière d'un disque de rayon R	39
3.2.	Illustration de la réduction des longueurs des chemins courts lors d'une réduction du libre parcours moyen pour un même ensemble d'événements statistiques	40
3.3.	Illustration des trajectoires correspondant aux variables aléatoires L et R	44
4.1.	Calcul de la longueur d'un trajet de diffusion dans une couche mono-dimensionnelle.	55
4.2.	Algorithme d'évaluation de la longueur moyenne d'un trajet de diffusion dans une couche mono-dimensionnelle par une méthode de Monte-Carlo analogue à N générations aléatoires.	58
4.3.	Évaluation des moments d'ordre 1, 2 et 3 de la longueur des chemins de premier retour dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo, pour une fonction de phase isotrope.	74
4.4.	Calcul de $\langle L^2 \rangle$ par la méthode de Monte-Carlo et comparaison avec la prédiction du modèle de [5].	75
4.5.	Calcul de $\langle L^3 \rangle$ par la méthode de Monte-Carlo et comparaison avec la prédiction du modèle de [5].	76

4.6.	Évaluation des moments d'ordre 1, 2 et 3 de la longueur des chemins de premier retour dans un cube par une méthode de Monte-Carlo pour une fonction de phase isotrope.	77
4.7.	Calcul de la sensibilité de $\langle L^2 \rangle$ au coefficient de diffusion k_s par la méthode de Monte-Carlo.	77
5.1.	Diffusion dans une situation mono-dimensionnelle pure.	81
5.2.	Erreur relative du monôme de plus haut degré par rapport à la solution analytique dans l'évaluation de $\langle (L/E)^n \rangle$ pour une situation de diffusion mono-dimensionnelle.	84
5.3.	Évaluation de $\beta_{0,2}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo.	90
5.4.	Évaluation de $\beta_{1,3}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo.	90
5.5.	Évaluation de $\beta_{0,3}$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie par une méthode de Monte-Carlo.	91
5.6.	Évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo et représentation graphique du polynôme reconstruit à partir de ces résultats. . . .	91
5.7.	Erreur relative associée à l'utilisation de la forme polynomiale pour l'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$	92
5.8.	Évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo et représentation graphique du polynôme reconstruit à partir de ces résultats. . . .	92
5.9.	Erreur relative associée à l'utilisation de la forme polynomiale pour l'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$	93
5.10.	Comparaison de l'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo et par le monôme.	95
5.11.	Comparaison de l'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ par une méthode de Monte-Carlo et par le monôme.	96
5.12.	Erreur relative du monôme par rapport à la solution analytique dans l'évaluation de $\langle (L/E)^n \rangle$ pour une situation de diffusion mono-dimensionnelle.	97
5.13.	Évaluation de $\langle t \rangle$, temps de résidence moyen prévu par l'approximation de diffusion telle que mise en oeuvre dans [5] pour un Dirac.	98
5.14.	Comportement du modèle pour la ligne : Moment d'ordre 2.	103
5.15.	Comportement du modèle pour la ligne : Moment d'ordre 3.	104
5.16.	Comportement du modèle pour la ligne : Moment d'ordre 4.	105
5.17.	Comportement du modèle pour le slab : Moment d'ordre 2.	106
5.18.	Comportement du modèle pour le slab : Moment d'ordre 3.	107
6.1.	Comparaison des différentes méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ dans un cube.	116
6.2.	Comparaison des différentes méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ dans un cube.	117
6.3.	Comparaison de deux méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^2 \rangle$ dans un cube.	118
6.4.	Comparaison de deux méthodes d'évaluation de $\langle (L/E)^3 \rangle$ dans un cube.	118

Liste des tableaux

3.1.	Calcul par Monte-Carlo de $\langle L \rangle$ and $\partial_k \langle L^2 \rangle$ pour une couche monodimensionnelle d'épaisseur δ	47
4.1.	Extraits des résultats illustrés dans le graphe 4.3.	73
4.2.	Extraits des résultats illustrés dans le graphe 4.6.	75
5.1.	Expression analytique des coefficients des 7 premiers moments de la longueur de premier retour L dans un problème purement mono-dimensionnel.	84
5.2.	Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ à partir de simulations de Monte-Carlo dans une couche mono-dimensionnelle infinie.	89
5.3.	Extrait des données de simulation de $\langle t \rangle$, temps de résidence moyen prévu par l'approximation de diffusion pour un Dirac.	99
5.4.	Valeurs du paramètre γ	100
5.5.	Récapitulatif des résultats sur la ligne en termes de coefficients polynomiaux : solution exacte et solution correspondant à $R^{diff-P1}$	103
5.6.	Récapitulatif des résultats sur le slab en termes de coefficients polynomiaux.	104
6.1.	Influence du paramètre $\Delta\tau$ dans l'évaluation numérique des $\langle (L/E)^n \rangle$ dans une couche mono-dimensionnelle.	111
6.2.	Estimation des coefficients $\beta_{n-1,n}$ dans une couche mono-dimensionnelle.	111
6.3.	Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ dans une couche mono-dimensionnelle.	112
6.4.	Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ à partir des simulations de Monte-Carlo dans un cube.	114
6.5.	Estimation des coefficients $\beta_{i,n}$ dans un cube.	115
A.1.	Résultats de l'expression polynomiale en $1/K_n$ de $\langle (L/E)^n \rangle$ dans une couche mono-dimensionnelle infinie.	124

Bibliographie

- [1] J. ARVO et D. KIRK. « 6 A Survey of Ray Tracing Acceleration Techniques ». *An introduction to ray tracing*, page 201, 1989.
- [2] JN BARDSLEY et A. DUBI. « The Average Transport Path Length in Scattering Media ». *SIAM Journal on Applied Mathematics*, pages 71–77, 1981.
- [3] O. BÉNICHOU, M. COPPEY, M. MOREAU, P. H. SUET et R. VOITURIEZ. « Averaged residence times of stochastic motions in bounded domains ». *Europhysics Letters*, 70(1) :42–48, 2005.
- [4] S. BLANCO et R. FOURNIER. « An invariance property of diffusive random walks ». *Europhysics Letters*, 61(2) :168–173, 2003.
- [5] S. BLANCO et R. FOURNIER. « Short-Path Statistics and the Diffusion Approximation ». *Physical Review Letters*, 97(230604), 2006.
- [6] M BOFFETY, M ALLAIN, A SENTENAC, M MASSONNEAU et R CARMINATI. « Analysis of the depth resolution limit of luminescence diffuse optical imaging ». *Optics Letters*, 33(20) :2290–2292, 2008.
- [7] Matthieu BOFFETY. « *Étude quantitative de la propagation lumineuse en milieux complexes. Application à l'imagerie biomédicale.* ». Thèse de Doctorat (en cours).
- [8] M. CHALLET, V. FOURCASSIÉ, S. BLANCO, R. FOURNIER, G. THERAULAZ et C. JOST. « A new test of random walks in heterogeneous environments ». *Naturwissenschaften*, 92(8) :367–370, 2005.
- [9] Mélanie CHALLET. « *Influence de la température et des courants d'air sur la morphogénèse des cimetières chez la fourmi *Messor sancta*.* ». Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, 2005.
- [10] L. CLAUSTRES, M. PAULIN et Y. BOUCHER. « BRDF measurement modelling using wavelets for efficient path tracing ». Dans *Computer Graphics Forum*, volume 22, pages 701–716. Blackwell Publishing, Inc, 2003.
- [11] R.E. DANIELSON, D.R. MOORE et H.C. van de HULST. « The transfer of visible radiation through clouds ». *Journal of the Atmospheric Sciences*, 26 :1078–1087, 1969.
- [12] B. DAVISON. *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press, Clarendon Press, 1958.
- [13] A. de LATAILLADE, S. BLANCO, Y. CLERGENT, J.L. DUFRESNE, M. El HAFI et R. FOURNIER. « Monte Carlo method and sensitivity estimations ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75 :529–538, 2002.

- [14] A. de LATAILLADE, J.L. DUFRESNE, M. EL HAFI, V. EYMET et 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.
- [15] R. G. DEISSLER. « Diffusion approximation for thermal radiation in gases with jump boundary conditions ». *ASME Journal of Heat Transfer*, 86(2) :240–346, 1964.
- [16] Vincent EYMET. « K-distribution Atmospheric Radiation : Infrared Net Exchanges - [http ://web.lmd.jussieu.fr/~eymet/karine.html](http://web.lmd.jussieu.fr/~eymet/karine.html) ».
- [17] Richard FOURNIER et Stéphane BLANCO. « Approximation de diffusion ». Dans *Action Concertée en Rayonnement Thermique*, Modèles de transfert radiatif par approximation de diffusion : état de l'art, Nancy, 1er et 2 avril 2004. LEMTA : Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée.
- [18] E.M. GELBARD et J. SPANIER. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Addison-Wesley Pub. Co., 1969.
- [19] A.S. GLASSNER. *An introduction to ray tracing*. Academic Press Ltd. London, UK, UK, 1989.
- [20] J.M. HAMMERSLEY et D.C. HANDSCOMB. *Monte Carlo methods*. London : Chapman and Hall, 1964.
- [21] X.D. HE, K.E. TORRANCE, F.X. SILLION et D.P. GREENBERG. « A comprehensive physical model for light reflection ». *ACM SIGGRAPH Computer Graphics*, 25(4) :175–186, 1991.
- [22] L.G. HENYEVY et J.L. GREENSTEIN. « Diffuse radiation in the galaxy ». *Astrophysical Journal*, 93 :70–83, 1941.
- [23] Akira ISHIMARU. *Wave Propagation and Scattering in Random Media*. IEE Press, 1997.
- [24] F. JAMES et WT EADIE. *Statistical methods in experimental physics*. World Scientific Pub Co Inc, 2006.
- [25] J.T. KAJIYA. « The rendering equation ». *ACM SIGGRAPH Computer Graphics*, 20(4) :143–150, 1986.
- [26] M.H. KALOS et P.A. WHITLOCK. *Monte Carlo Methods, Basics*. Wiley-Interscience, 1986.
- [27] L. KUIPERS et H. NIEDERREITER. *Uniform distribution of sequences*. Wiley New York, 1974.
- [28] B. LAPEYRE, E. PARDOUX et R. SENTIS. *Methodes de Monte-Carlo pour les equations de transport et de diffusion, vol. 29 of Mathematiques & Applications*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [29] G. MARSAGLIA. « A current view of random number generators ». Dans *Computer science and statistics : 16th symposium on the interface*. Elsevier, 1985.
- [30] A. MAZZOLO. « Properties of diffusive random walks in bounded domains ». *Euophysics Letters*, 68(3) :350–355, 2004.

-
- [31] A. MAZZOLO. « Properties of uniform random walks in bounded convex bodies ». *Journal of Physics A Mathematical and General*, 37(28) :7095–7111, 2004.
- [32] A. MAZZOLO. « On the mean number of collisions suffered by neutrons in bounded domains ». *Annals of Nuclear Energy*, 32(6) :549–557, 2005.
- [33] A. MAZZOLO. « On the generalization of the average chord length ». *Annals of Nuclear Energy*, 35(3) :503–506, 2008.
- [34] A. MAZZOLO, B. ROESSLINGER et W. GILLE. « Properties of chord length distributions of nonconvex bodies ». *Journal of Mathematical Physics*, 44 :6195, 2003.
- [35] N. METROPOLIS, A. W. ROSENBLUTH, M. N. ROSENBLUTH, A. H. TELLER et E. TELLER. « Equation of state calculation by fast computing machines. ». *Journal of Chemical Physics*, 21(6) :1087–1092, 1953.
- [36] M.F. MODEST. *Radiative Heat Transfer*. Elsevier Science, 2003.
- [37] M.F. MODEST et F.H. AZAD. « The influence and treatment of Mie-anisotropic scattering in radiative heat transfer ». *ASME Journal of Heat Transfer*, 102 :92–98, 1980.
- [38] P.M. MORSE et H. FESHBACH. *Methods of theoretical physics. Vol. I. II*. McGraw-Hill, 1953.
- [39] H. NIEDERREITER. *Random number generation and quasi-Monte Carlo methods*. Society for Industrial Mathematics, 1992.
- [40] Patrice PEREZ. « Algorithmes de synthèse d’images et propriétés spectrales de gaz de combustion : Méthode de Monte Carlo pour la simulation des transferts radiatifs dans les procédés à haute température ». Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003. N° d’ordre : 1980.
- [41] Matt PHARR et Greg HUMPHREYS. *Physically Based Rendering, from theory to implementation*. Elsevier Inc., 2004.
- [42] Bui Tuong PHONG. « Illumination for computer generated pictures ». *Commun. ACM*, 18(6) :311–317, 1975.
- [43] Sidney REDNER. *A guide to first-passage processes*. Cambridge Univ Pr, 2001.
- [44] L. REYNOLDS. « Optical diffuse reflectance and transmittance from an anisotropically scattering finite blood medium ». Ph.D Dissertation, Univ. of Washington, Seattle, 1975.
- [45] Maxime ROGER. « Modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de Monte-Carlo : Illustrations en transfert radiatif ». Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006. N° d’ordre : 2343.
- [46] Maxime ROGER, Stéphane BLANCO, Mouna EL HAFI et Richard FOURNIER. « Monte Carlo estimates of domain-deformation sensitivities ». *Physical Review Letter*, 95(18) :180601, october 2005.
- [47] S.M. RUBIN et T. WHITTED. « A 3-dimensional representation for fast rendering of complex scenes ». Dans *Proceedings of the 7th annual conference on Computer*

- graphics and interactive techniques*, pages 110–116. ACM New York, NY, USA, 1980.
- [48] R. SIEGEL et J.R. HOWELL. *Thermal radiation heat transfer*. Hemisphere Pub, 2002.
- [49] Chandrasekhar SUBRAHMANYAN. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, Clarendon Press, 1950.
- [50] E. VEACH. « *Robust Monte Carlo methods for light transport simulation* ». PhD thesis, Stanford University, 1997.
- [51] H. VENTSEL. *Théorie des probabilités*. Editions Mir, Moscou, 1973.
- [52] J. VON NEUMANN. « Various techniques used in connection with random digits ». *Applied Math Series*, 12 :36–38, 1951.
- [53] Turner WHITTED. « An improved illumination model for shaded display ». *Commun. ACM*, 23(6) :343–349, 1980.

Etude statistique des chemins de premier retour aux nombres de Knudsen intermédiaires : De la simulation par méthode de Monte Carlo à l'utilisation de l'approximation de diffusion

AUTEUR : Julien Yves ROLLAND

DIRECTEURS DE THESE : Mouna EL HAFI & Richard FOURNIER

LIEU ET DATE DE SOUTENANCE : Ecole des Mines d'Albi, le 10 Novembre 2009

En présence de diffusions multiples, les algorithmes de Monte-Carlo sont trop coûteux pour être employés dans les algorithmes de reconstruction d'images de géométries tridimensionnelles réalistes. Pour des trajectoires de premiers retours, l'approximation de diffusion est communément employée afin de représenter la statistique des chemins aux nombres de Knudsen tendant vers zéro. En formulant des problèmes équivalents sur des trajectoires de premiers passages, l'usage de l'approximation est étendue en un développement théorique. Cette nouvelle formulation assure un bon niveau de précision, sur une large plage de valeurs du nombre de Knudsen en ce qui concerne l'évaluation des moments de la distribution des longueurs des chemins de premier retour. La résolution numérique du modèle formulé est confrontée aux simulations numériques type Monte-Carlo sur des géométries mono-dimensionnelles et un cas tridimensionnel ouvrant des perspectives vers une généralisation aux applications réelles.

Mots-clés : Premier retour, premier passage, épaisseur optique de diffusion, diffusion multiple, nombre de Knudsen

Statistical study of first return paths for intermediate Knudsen numbers: From Monte-Carlo simulations to the diffusion approximation use.

For multiple scattering, Monte-Carlo algorithms are computationally too demanding for use in image reconstruction of 3D realistic geometries. In the study of first return path, the diffusion approximation is commonly used to represent their statistical behaviour when the Knudsen number tends to zero. With the formulation of equivalent problems for first passage path, the use of the approximation is extended in a theoretical development. The new model provides a good level of accuracy, for a wide distribution of Knudsen numbers when evaluating the moments distribution of the first return paths length. Numerical application of the model is confronted to Monte-Carlo simulations on one dimension geometries and a simple three-dimension case opening perspectives for the generalization to practical applications.

Keywords: First return, first passage, diffusion optical thickness, multiple scattering, Knudsen number

DISCIPLINE ADMINISTRATIVE : Énergétique et Transferts

INTITULE ET ADRESSE DE L'U.F.R. OU DU LABORATOIRE :

Centre de Recherche d'Albi en Génie des Procédés des Solides Divisés, de l'Énergie et de l'Environnement (RAPSODEE) – FRE 3213 – Ecole des Mines d'Albi Carmaux – Campus Jarlad, Route de Teillet – 81013 Albi CT Cedex 09 - France