



HAL
open science

Introduction aux méthodes de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif

Mouna El-Hafi, Franck Enguehard, Y. Favennec, Richard Fournier

► **To cite this version:**

Mouna El-Hafi, Franck Enguehard, Y. Favennec, Richard Fournier. Introduction aux méthodes de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif. Doctorat. France. 2022. hal-03878236

HAL Id: hal-03878236

<https://hal.science/hal-03878236v1>

Submitted on 29 Nov 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Introduction aux méthodes de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif

Mouna El Hafi¹, Franck Enguehard², Yann Favennec³, et Richard Fournier⁴

¹*Rapsodee, École des Mines d'Albi*

²*Institut Pprime, Université de Poitiers*

³*LTEN, Nantes Université*

⁴*Laplace, Université de Toulouse*

pour l'école MATTER du GdR Tamarys – Île d'Oléron – mai 2022

Table des matières

1	Introduction	2
2	Années 1950-1970 – phase historique	3
2.1	Approche statistique	3
2.1.1	Terme de transport	4
2.1.2	Estimer l'incertitude de l'estimateur	6
2.1.3	Lecture probabiliste de la physique du rayonnement	9
2.1.4	Intégration directionnelle du transport sans récursivité (sans diffusion, sans réflexion)	11
2.1.5	Terme d'intégration directionnelle	20
2.1.6	Synthèse de la littérature de cette première phase	21
2.2	Approche déterministe :	24
2.2.1	Terme de transport : différences finies et volumes finis	24
2.2.2	Terme d'intégration angulaire : méthode des harmoniques sphériques	28
3	Années 1970-2000 – phase intermédiaire	32
3.1	Approche statistique	32
3.1.1	Formulation intégrale associée à un algorithme analogue	33
3.1.2	Conception de nouveaux algorithmes à partir de la formulation intégrale	34
3.1.3	Les algorithmes à variance nulle	35
3.2	Approche déterministe : méthode des ordonnées discrètes	36
3.2.1	Quadrature S_n	37
3.2.2	Partitionnement de la sphère	39
3.2.3	Éléments de comparaison	40
4	Années 2000-2020 – phase actuelle et recherches en cours	42
4.1	Approche statistique	42
4.1.1	L'arrivée de l'informatique graphique	43
4.1.2	Espace de chemins, formulation en processus, couplage et non-linéarité	44
4.1.3	La question de l'analyse	47
4.2	Approche déterministe : les éléments finis	48
4.2.1	Éléments finis angulaires	50
4.2.2	Méthode de Galerkin	53
4.2.3	Méthode de Galerkin discontinue	54
4.2.4	Éléments finis stabilisés	55
4.2.5	Éléments finis vectoriels	56
4.2.6	Solveurs itératifs	58
4.2.7	Bibliothèques mathématiques	58

1 Introduction

Le transfert thermique par rayonnement au sein des milieux semi-transparents est régi par l'équation de transfert radiatif. Dans un milieu homogène (donc dépourvu de tous gradients d'indice de réfraction et de propriétés radiatives), la version monochromatique de cette équation s'écrit sous la forme suivante [1, 2] :

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_{\mathbf{x}} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = -\kappa_{e\nu} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) + \kappa_{a\nu} L_{\nu}^0(T(\mathbf{x})) + \kappa_{d\nu} \int_{4\pi} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \quad (1)$$

Dans cette équation :

- $L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ est le champ de luminance monochromatique directionnelle, qui dépend de la position \mathbf{x} , de la direction $\boldsymbol{\omega}$ (vecteur unitaire) et de la variable spectrale caractérisant le rayonnement (ici la fréquence ν).
- $\kappa_{a\nu}$, $\kappa_{d\nu}$, $\kappa_{e\nu}$ et $p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}')$ sont les propriétés radiatives monochromatiques du MST, à savoir respectivement son coefficient d'absorption, son coefficient de diffusion, son coefficient d'extinction (vérifiant $\kappa_{e\nu} = \kappa_{a\nu} + \kappa_{d\nu}$) et sa fonction de phase de diffusion. Cette dernière dépend a priori des directions d'incidence $\boldsymbol{\omega}'$ et d'émergence $\boldsymbol{\omega}$ et vérifie la condition de normalisation suivante :

$$\forall \boldsymbol{\omega}', \quad \int_{4\pi} p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega} = 1 \quad (2)$$

- La notation $L_{\nu}^0(T)$ réfère à la luminance du corps noir dans le milieu semi-transparent à la température T ; cette luminance inclut donc le carré de l'indice de réfraction du milieu semi-transparent à la fréquence ν .
- Enfin, $T(\mathbf{x})$ est le champ de température régnant dans le milieu semi-transparent.

L'équation de transfert radiatif (1) est une équation de volume, i.e. elle s'applique à tous les points intérieurs au domaine de calcul; elle doit donc être accompagnée de conditions aux limites sur toutes les frontières du domaine. Dans l'hypothèse assez générale où le milieu semi-transparent se trouve à l'intérieur d'une enceinte dont les parois sont toutes opaques, partiellement absorbantes (donc d'émissivités comprises entre 0 et 1) et réfléchissant le rayonnement de manière diffuse, ces conditions aux limites s'écrivent sous la forme suivante [1, 2] :

$$L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega} / \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} < 0) = \epsilon_{p\nu}(\mathbf{x}) L_{\nu}^0(T_p(\mathbf{x})) + \frac{1 - \epsilon_{p\nu}(\mathbf{x})}{\pi} \int_{\boldsymbol{\omega}' / \boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} > 0} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') (\boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}}) d\boldsymbol{\omega}' \quad (3)$$

Dans cette égalité :

- \mathbf{n}_{ext} est le vecteur unitaire normal à la frontière du domaine de calcul et orienté vers l'extérieur de celui-ci.
- Les directions $\boldsymbol{\omega}$ concernées sont telles que $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} < 0$; autrement dit, ce sont les directions "entrant" dans le milieu semi-transparent.
- Les champs $\epsilon_{p\nu}(\mathbf{x})$ et $T_p(\mathbf{x})$ sont respectivement les champs d'émissivité monochromatique et de température des parois de l'enceinte. Remarque : ces parois étant supposées réfléchir le rayonnement de manière diffuse, il s'ensuit que les émissivités sont isotropes.
- Enfin, l'intégrale angulaire (dernier terme à droite du signe égal de (3)) concerne toutes les directions $\boldsymbol{\omega}'$ telles que $\boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} > 0$; autrement dit, il s'agit d'une intégrale angulaire sur l'hémisphère des directions "sortant" du milieu semi-transparent.

Le système mathématique constitué de l'équation de transfert radiatif (1) (équation de volume) et des conditions aux limites (3) sur toutes les frontières du domaine est un système clos; sa solution, i.e. le champ de luminance $L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$, est donc unique. Par ailleurs, on remarquera que la détermination de ce champ nécessite la connaissance préalable des propriétés radiatives du milieu semi-transparent ($\kappa_{a\nu}$, $\kappa_{d\nu}$ et $p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}')$), du champ de température $T(\mathbf{x})$ régnant en son sein et des champs d'émissivité $\epsilon_{p\nu}(\mathbf{x})$ et de température $T_p(\mathbf{x})$ des parois de l'enceinte. Enfin, on notera que les équations (1) et (3) régissant le champ de luminance sont linéaires.

L'équation de transfert radiatif sous la forme de l'équation (1) ne fait pas apparaître explicitement la variable temporelle t . Cette équation (1), qui est en réalité la version stationnaire de l'équation de transfert radiatif, peut être étendue à une version quasi-stationnaire dans laquelle la luminance et la température dépendent explicitement du temps

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_{\mathbf{x}} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t) = -\kappa_{e\nu} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t) + \kappa_{a\nu} L_{\nu}^0(T(\mathbf{x}, t)) + \kappa_{d\nu} \int_{4\pi} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}', t) p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \quad (4)$$

Cette version quasi-stationnaire sous-entend que le champ de luminance s'adapte en temps réel aux sollicitations thermiques du milieu, et est donc applicable aux problèmes de transfert radiatif pour lesquels les temps caractéristiques

associés aux sollicitations thermiques sont très longs devant les temps caractéristiques associés au transfert radiatif. L'énergie radiative se propageant à une vitesse (la vitesse de groupe) dont l'ordre de grandeur est celui de la célérité de la lumière dans le milieu, cette hypothèse de quasi-stationnarité est valable dans la très grande majorité des cas. Cependant, dans certains domaines comme l'astrophysique, la physique des plasmas ou encore certaines cinétiques de photoluminescence ultrarapides, cette hypothèse tombe en défaut, et un terme instationnaire impliquant la vitesse de groupe v_g doit être ajouté à l'équation de transfert radiatif :

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial L_\nu(\mathbf{x}, \omega, t)}{\partial t} + \omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega, t) = -\kappa_{e\nu} L_\nu(\mathbf{x}, \omega, t) + \kappa_{a\nu} L_\nu^0(T(\mathbf{x}, t)) + \kappa_{d\nu} \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \omega', t) p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega') d\omega' \quad (5)$$

Dans le cadre de ce cours, nous nous limitons à une équation de transfert radiatif stationnaire en milieu semi-transparent homogène (équation (1)). De plus, le milieu est supposé totalement participant : aucun des quatre termes du bilan d'énergie radiative (atténuation par absorption, atténuation par diffusion, renforcement par émission, renforcement par diffusion) ne peut être ignoré. Dans ces conditions, l'équation de transfert radiatif est une équation de type intégral-différentielle qui ne peut être résolue que de manière approchée via des méthodes numériques adaptées.

Le terme différentiel dans cette équation, i.e. $\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega)$, rend compte du transport de l'énergie radiative le long d'une direction d'observation donnée. Ce terme faisant intervenir des dérivées spatiales d'ordre 1 du champ inconnu, il confère à l'équation de transfert radiatif le statut d'équation de transport, au même titre que l'équation de Boltzmann régissant la dynamique des neutrons ou encore celle des vibrations du réseau cristallin (les phonons). Quant au terme intégral apparaissant dans l'équation de transfert radiatif, i.e. $\int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega') d\omega'$, ce terme rend compte de la redistribution angulaire de l'énergie radiative produite par le phénomène de renforcement par diffusion.

Dans ce document consacré aux méthodes de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif, nous avons pris le parti de parcourir l'évolution de la pensée scientifique autour de cette thématique de manière chronologique, depuis le début de cette activité (dans les années 1950) jusqu'à nos jours. Comme on le verra dans la suite, ces travaux d'ordre numérique sont restés en permanence adossés à des réflexions soit d'ordre mathématique soit d'ordre physique (et quelquefois des deux).

Dès les années 1950, deux approches de philosophies très différentes sont envisagées pour la résolution numérique de l'équation de transfert radiatif :

- D'une part, des méthodes déterministes sont proposées, par exemple dans l'ouvrage de S. Chandrasekhar publié en 1950 [3], pour traiter la dimension directionnelle de l'équation de transfert radiatif : méthode des harmoniques sphériques d'une part et des ordonnées discrètes d'autre part. Ces méthodes se basent sur un regard essentiellement mathématique et numérique de l'équation de transfert radiatif : il s'agit en l'occurrence de mettre au point des algorithmes permettant de calculer efficacement et avec précision le terme de transport et le terme de redistribution angulaire de l'énergie radiative.
- Dans le même temps, dans la lignée de l'article fondateur de N. Metropolis et S. Ulam publié en 1949 [4], un nombre croissant de méthodes stochastiques (historiquement baptisées "Monte Carlo" dans [4] en référence à la ville du jeu et du hasard) sont proposées en réponse aux défis posés par la résolution numérique de l'équation de transfert radiatif. A la différence des méthodes déterministes, ces méthodes stochastiques traduisent un regard très physique du transfert radiatif, puisqu'elles consistent à suivre les trajets (soit directs soit inverses) d'une multitude de rayonnements au fur et à mesure de leurs diverses interactions avec le milieu semi-transparent.

Dès les années 1950 et quelle que soit l'approche retenue (déterministe ou stochastique), les réflexions se concentrent sur les deux spécificités de l'équation de transfert radiatif : d'une part le terme de transport, et d'autre part le terme d'intégration angulaire associé au phénomène de renforcement par diffusion. Dans ce document, nous allons suivre les évolutions au cours du temps des deux écoles de pensée (l'école stochastique et l'école déterministe) quant à l'appréhension de ces deux spécificités, en distinguant trois périodes successives : les années 1950-1970, phase de proposition des méthodes et de premiers travaux de mise en œuvre de celles-ci (section 2), puis les années 1970-2000, phase de développements intenses stimulés entre autres par l'augmentation constante de la puissance de calcul (section 3), et enfin les années 2000-2020 où nous décrirons quelques thématiques de recherche en cours (section 4).

2 Années 1950-1970 – phase historique

2.1 Approche statistique

Nous proposons ici une description des premières étapes historiques de la pratique de Monte Carlo dans le contexte de la physique des transferts thermiques radiatifs (ingénierie thermique, échanges énergétiques au sein de l'atmosphère, au sein

de différents objets stellaires, etc). A quelques détails près, la description serait identique si nous nous intéressions à la physique du rayonnement dans un contexte expérimental (techniques de mesure fondées sur la physique radiative), ou même si nous considérions la physique du transport d'autres types de particules que des photons, typiquement en neutronique et en physique des plasmas. Par contre, nous laissons de côté différents pans de la littérature sur la méthode de Monte Carlo, notamment ceux associés à la physique statistique de l'équilibre ou plus récemment à l'inversion bayésienne. Ici nous suivons donc des particules et la modélisation de ces particules est supposée rentrer dans le cadre général de la physique du transport (ou physique cinétique) avec l'équation de Boltzmann comme socle théorique. Nous ne parlons que de photons, mais nous invitons le lecteur à entendre que le propos est plus général.

2.1.1 Terme de transport

Idée 1 *Découper les puissances radiatives émises en paquets de photons et les suivre.*

Prenons l'exemple de la puissance $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ correspondant à l'absorption par une surface noire \mathcal{S}_1 du rayonnement émis par une autre surface noire \mathcal{S}_0 isotherme à une température T_0 , en admettant que le milieu séparant \mathcal{S}_0 et \mathcal{S}_1 est parfaitement transparent. On peut également résumer la question en disant que l'on cherche le facteur de forme $F_{0,1}$ de \mathcal{S}_0 et \mathcal{S}_1 , c'est-à-dire la fraction des photons émis par \mathcal{S}_0 qui atteignent \mathcal{S}_1 . En effet la puissance émise par \mathcal{S}_0 est $\phi^e(\mathcal{S}_0) = S_0 \sigma T_0^4$ et la puissance $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ s'écrit $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) = \phi^e(\mathcal{S}_0) F_{0,1}$.

Dans un tel problème où le milieu est transparent l'équation de transfert radiatif se résume au terme de transport seulement :

$$\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu = 0 \quad (6)$$

L'image physique correspondante est la propagation de chaque photon en ligne droite depuis la surface opaque qui l'émet jusqu'à la rencontre d'une autre surface opaque (qui peut le réfléchir ou l'absorber). Donc les photons émis par \mathcal{S}_0 se propagent en ligne droite et la puissance que nous cherchons est celle correspondant à la partie de ces lignes droites qui intersectent \mathcal{S}_1 . Pour aborder cette question en termes statistiques, une première idée consiste à affirmer qu'aux échelles de temps qui nous intéressent, la puissance $\phi^e(\mathcal{S}_0)$ intégrée sur n'importe quel intervalle de temps Δt se traduit par une quantité d'énergie $\Delta t \phi^e(\mathcal{S}_0)$ qui peut être vue comme le résultat des énergies $h\nu$ emportées par un très grand nombre de photons (émis à toutes les fréquences ν auxquelles peut émettre un corps noir à T_0). Ce nombre de photons est tellement immense que l'on peut découper cette énergie en un nombre N de paquets d'énergie $\frac{1}{N} \Delta t \phi^e(\mathcal{S}_0)$ et N peut être aussi grand qu'on le souhaite, l'énergie de chaque paquet restera toujours très inférieure à $h\nu$. Même après division, on peut donc encore parler de paquets d'énergie chacun constitués d'un très grand nombre de photons. On voit que la pensée est déjà statistique (on fait appel aux grands nombres) même si aucune rigueur probabiliste n'a encore été proposée.

On va alors plus loin et on accepte que si N est grand, on peut regrouper les photons en fonction de leurs propriétés, ici simplement en fonction de leur position et leur direction d'émission. On pose donc que tous les photons d'un même paquet partent du même point sur la surface \mathcal{S}_0 et dans la même direction. On se retrouve donc avec des paquets qui atteignent \mathcal{S}_1 (tous les photons de ce paquet atteignent \mathcal{S}_1) ou qui ne l'atteignent pas. Il suffit alors de compter le nombre N^+ de paquets atteignant \mathcal{S}_1 pour estimer $\Delta t \phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$:

$$\Delta t \phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) \approx N^+ \left(\frac{1}{N} \Delta t \phi^e(\mathcal{S}_0) \right) \quad (7)$$

donc

$$\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) \approx \frac{N^+}{N} \phi^e(\mathcal{S}_0) \quad (8)$$

ou encore

$$F_{1,2} \approx \frac{N^+}{N} \quad (9)$$

Idée 2 *Quitter l'image du paquet de photons pour construire l'image d'une moyenne.*

Pour parvenir à l'équation (8) ou à l'équation (9), nous n'avons pas parlé de moyenne, mais seulement d'énergie radiative découpée en un grand nombre de paquets de photons. Nous aboutissons à un algorithme de Monte Carlo sans parler de moyenne, alors que la méthode de Monte Carlo a comme seul objectif de permettre l'estimation de moyennes (d'espérances, nous allons le voir plus bas). Il y a donc une moyenne cachée dans ce premier algorithme.

Rappelons l'algorithme estimant $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$:

- on considère successivement N paquets de photons ;
- pour chaque paquet on tire aléatoirement de façon uniforme une position d'émission \mathbf{x} sur \mathcal{S}_0 (car \mathcal{S}_0 est isotherme) et on tire aléatoirement de façon lambertienne une direction d'émission ω dans l'hémisphère sortant de \mathcal{S}_0 en \mathbf{x} (car \mathcal{S}_0 est noire) ;

- on trace une demi-droite partant de x dans la direction ω et on regarde si cette demi-droite intersecte \mathcal{S}_1 ;
- on compte le nombre N^+ de paquets intersectant \mathcal{S}_1 ;
- on multiplie N^+ par le poids de chaque paquet, i.e. par $\frac{1}{N} \phi^e(\mathcal{S}_0)$ (en omettant le Δt qui n'est utile que pour la rigueur du raisonnement en énergie).

Il n'est pas difficile de voir ici une prise de moyenne. Il suffit de dire que chaque paquet de photons porte $\phi^e(\mathcal{S}_0)$, et non plus $\frac{1}{N} \phi^e(\mathcal{S}_0)$. Soit le paquet atteint \mathcal{S}_1 , et alors il donne $\phi^e(\mathcal{S}_0)$ à \mathcal{S}_1 , soit il ne l'atteint pas, et alors il "donne zéro". L'estimation de la puissance absorbée par \mathcal{S}_1 , i.e. $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) \approx \frac{N^+}{N} \phi^e(\mathcal{S}_0)$, se lit alors comme la moyenne de N poids qui valent soit $\phi^e(\mathcal{S}_0)$, soit 0. De même, l'estimation du facteur de forme, i.e. $F_{0,1} \approx \frac{N^+}{N}$, se lit comme la moyenne de N poids qui valent soit 1 (\mathcal{S}_1 est atteinte), soit 0 (\mathcal{S}_1 n'est pas atteinte).

Ce changement de point de vue peut sembler anodin, mais il ne l'est pas : on rentre alors rigoureusement dans le cadre théorique de la méthode de Monte Carlo. $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ et $F_{0,1}$ sont chacun vus comme l'espérance d'une variable aléatoire *poids* et la méthode de Monte Carlo estime cette espérance en produisant un échantillon de taille N de cette variable aléatoire *poids* et en retenant la moyenne de l'échantillon. Ce qui est très important pour la suite c'est le fait que la puissance émise $\phi^e(\mathcal{S}_0)$ n'est plus découpée en N paquets. On ne parle plus de paquets. Pour chaque réalisation aléatoire l'image mentale reste celle d'un photon émis par $\phi^e(\mathcal{S}_0)$ et que l'on suit le long d'une trajectoire en ligne droite jusqu'à une éventuelle intersection avec \mathcal{S}_1 , mais *chaque "photon" porte l'intégralité de la puissance émise par \mathcal{S}_0* et on regarde la moyenne des puissances transmises à \mathcal{S}_1 (soit $\phi^e(\mathcal{S}_0)$, soit 0).

Cette logique est préservée dans la quasi-totalité des algorithmes proposés dans la phase initiale de Monte Carlo en transfert radiatif. On considère une source de rayonnement (une surface, un volume, etc), on suit un grand nombre de photons émis par cette source (selon les propriétés d'émission de la source), chaque photon "porte" l'intégralité de la puissance émise par la source (comme si un seul photon emportait toute la source), on regarde comment ce photon contribue à la grandeur étudiée, et on prend la moyenne. A partir de ce motif élémentaire, les variations proposées dans la littérature sont nombreuses, dès le début de la méthode, notamment celles qui permettent une réduction de la variance de l'estimateur (augmentation de sa précision), mais le point de départ est toujours le même : la physique s'énonce initialement comme la somme de contributions d'un grand nombre de particules et on apprend à reformuler la question en termes des moyennes sur des trajectoires particulières qui restent celles des particules initiales, seul le poids étant modifié. On parle de *méthode de Monte Carlo analogue* car aucun sacrifice n'est fait en termes intuitifs : la naissance et la trajectoire de chaque particule reflète rigoureusement leur modélisation physique et les algorithmes sont donc très faciles à écrire et à lire. Pour l'essentiel (l'essentiel des lignes de code), l'ordinateur simule des trajectoires. Il n'y a que sur les poids que le travail formel est parfois exigeant (mais rarement).

Idée 3 Estimer l'incertitude

Le principal bénéfice de cet ancrage dans le cadre théorique de Monte Carlo (penser en moyenne) est la capacité de quantifier l'incertitude de l'estimateur. On comprend bien que plus N est élevé (plus l'échantillon est de grande taille), plus l'estimateur est précis. Comme dans toutes les méthodes numériques, nous disposons donc d'un paramètre numérique ϵ , par exemple $\epsilon = \frac{1}{N}$, qui assure que l'estimateur converge vers la solution exacte lorsque ϵ tend vers 0. Mais nous verrons que Monte Carlo est très spécifique de ce point de vue : elle est une des rares méthodes numériques qui quantifie son incertitude de façon systématique. Il ne sera pas nécessaire de réaliser plusieurs estimations, pour plusieurs valeurs de ϵ , afin de contrôler que l'impact du choix de ϵ sur la valeur de l'estimateur est inférieur à la précision souhaitée. Chaque simulation de type Monte Carlo produit son incertitude. Si cette incertitude est inférieure à la précision souhaitée on peut retenir le résultat avec confiance sans avoir besoin de tester la sensibilité à ϵ . Sinon, on peut conserver l'échantillon réalisé et le compléter d'un autre échantillon jusqu'à atteindre la taille d'échantillon suffisante pour la précision souhaitée. On ne relance pas le calcul, on le complète.

Cette propriété de la méthode est essentielle et aucun utilisateur ne peut se passer d'une compréhension détaillée de la façon avec laquelle on parvient à "estimer l'incertitude de l'estimateur". Nous y consacrons donc la section suivante. Mais en attendant les conseils pratiques correspondants, ainsi que leur justification théorique, nous donnons dès maintenant l'algorithme de calcul de $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ tel qu'il est implémenté en pratique. Nous avons déjà vu que cet algorithme produit un estimateur, qu'à partir de maintenant nous noterons m , comme la moyenne de N poids dont nous avons parlé précédemment ($\phi^e(\mathcal{S}_0)$ si le photon atteint \mathcal{S}_1 et 0 sinon) et que nous noterons $w_1, w_2 \dots w_N$. Pour N grand on a donc

$$\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) \approx m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i \quad (10)$$

L'incertitude de l'estimateur est notée s et elle est calculée à partir de la variance des poids (donc en calculant la moyenne du carré des poids) :

$$s = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i^2 - m^2 \right) \quad (11)$$

L'algorithme peut donc être décomposé en deux parties (et ce sera toujours le cas). La première partie est générale et vaut pour tous les algorithmes de Monte Carlo : elle ne détaille pas la façon de réaliser les poids et se concentre sur la construction de l'estimateur et de son incertitude :

```

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

```

Algorithme 1 : Partie commune à tous les algorithmes de Monte Carlo

La seconde partie décrit ce qui relève spécifiquement du calcul proposé, ici le calcul de $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$, c'est-à-dire la réalisation du poids.

```

Echantillonnage d'une position  $\mathbf{x}$  sur  $\mathcal{S}_0$  selon une loi uniforme;
Echantillonnage d'une direction  $\omega$  selon une loi lambertienne autour de la normale à  $\mathcal{S}_0$  en  $\mathbf{x}$ ;
Recherche de l'éventuelle intersection avec  $\mathcal{S}_1$  de la demi-droite  $(\mathbf{x}, \omega)$ ;
if intersection then
   $w = \phi^e(\mathcal{S}_0)$ ;
else
   $w = 0$ ;
end

```

Algorithme 2 : Echantillonnage du poids pour l'algorithme de calcul de $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$

2.1.2 Estimer l'incertitude de l'estimateur

Laissons temporairement de côté le cas particulier du transfert radiatif. Nous avons vu plus généralement que tout algorithme de Monte Carlo produit un estimateur m de la grandeur étudiée, que nous noterons ici A , et que cet estimateur est construit comme la moyenne d'un nombre N de poids $w_1, w_2 \dots w_N$:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i \quad (12)$$

La question est ici de s'assurer que $A \approx m$ pour un niveau de précision donné. Pour répondre à cette question, on fait appel aux mêmes techniques statistiques que celles employées communément lors de l'évaluation des incertitudes de mesure en physique expérimentale. On calcule notamment la grandeur suivante :

$$s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i^2 \right) - m^2} \quad (13)$$

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

Pour autant, aucune présentation de la méthode de Monte Carlo ne peut manquer de conseiller aux utilisateurs de prendre le temps d'acquérir un minimum de maîtrise des principaux concepts de la théorie statistique. Même en oubliant les situations pathologiques que nous venons de mentionner, c'est la garantie de pratiquer la méthode avec beaucoup plus de sérénité, notamment lorsqu'il est question d'optimisation de convergence. Les spécialistes de la méthode de Monte Carlo ont toujours à cœur de mettre en avant la dimension très intuitive de leur pratique, montrer à quel point l'immense majorité des algorithmes référencés dans la littérature sont construits à partir d'images physiques très simples, avec très peu d'exigence en termes de développements formels ... à une exception notable près : même dans les cas les plus simples, il est essentiel d'apprendre à interpréter m comme une réalisation aléatoire *unique* d'une variable aléatoire M dont l'espérance est égale à la grandeur recherchée : $A = \mathbb{E}(M)$.

L'idée correspondante est la suivante. Quand on conçoit un algorithme de Monte Carlo, même si on le conçoit de façon analogue, on manipule deux variables aléatoires qui ont la même espérance : W (le poids) et M (la moyenne de N réalisations indépendantes de W). Si l'algorithme effectue N réalisations indépendantes de W , c'est dans le but d'effectuer une unique réalisation de M . Si on revient à l'exemple du calcul de $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$, chaque photon suivi se traduit par une réalisation du poids ($w_i = \phi^e(\mathcal{S}_0)$ ou $w_i = 0$ selon que le i -ième photon rencontre ou non la surface \mathcal{S}_1) et la moyenne des N poids sert à évaluer la puissance échangée car l'espérance de W est égale à $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ (comme nous l'avons montré en passant par les paquets de photons). Il y a donc bien une première variable aléatoire *poids*, dont nous avons déjà dit que l'espérance était $\mathbb{E}(W) = \phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$, mais lorsque nous calculons $m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i$ nous en faisons apparaître une seconde. En effet, si on relançait le calcul avec N réalisations aléatoires différentes (ce que l'on ne fait jamais, nous verrons ultérieurement pourquoi), on obtiendrait une autre valeur de m , donc une estimation différente de la puissance échangée. Le résultat du calcul est aléatoire. On comprend alors pourquoi il y a une parenté forte entre Monte Carlo et mesure expérimentale. Avec cette simple image, on peut donc directement faire appel à la connaissance élémentaire que tout scientifique a de la théorie de la mesure pour comprendre comment est utilisée l'incertitude statistique s dans la pratique de Monte Carlo : la mesure M est supposée gaussienne et s est un estimateur de l'écart type de cette gaussienne. Donc lorsque s est fiable (au sens défini ci-dessus) la probabilité d'avoir $A \in [m - 2s, m + 2s]$ est environ 0.95 et celle d'avoir $A \in [m - 3s, m + 3s]$ est environ 0.996 : le calcul est précis à $2s$ près dans 95% des cas ; il est précis à $3s$ près dans 99,6% des cas. La pratique est donc communément la suivante :

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

Il suffit de garder en mémoire cet enchaînement pour accéder à un premier niveau de pratique de la méthode. Nous n'avons pas justifié théoriquement le fait que la variable aléatoire M suit une loi gaussienne : cette justification est le théorème de la limite centrale, l'idée essentielle étant que les différentes réalisations du poids sont indépendantes et que lorsqu'on somme un grand nombre de variables aléatoires indépendantes, la variable aléatoire somme devient rapidement une gaussienne. Dans la pratique de Monte Carlo le nombre de réalisations est toujours très élevé, notamment par rapport à ce que l'on rencontre dans la pratique expérimentale, et on peut retenir que cette limite gaussienne est toujours atteinte.

Aide - Un premier exemple

Considérons un jeu de pile ou face. L'expérience est donc le jet d'une pièce et la variable aléatoire associée est X qui prend la valeur 0 si la pièce tombe du côté pile et la valeur 1 si la pièce tombe du côté face. Nous savons que l'espérance de X est 0.5 (soit $\mathbb{E}(X) = 0.5$). Si on utilise la méthode de Monte Carlo pour estimer cette espérance, alors on réalise un grand nombre N de jets et pour chaque jet on note la valeur de X . On obtient ainsi N réalisations $x_1, x_2 \dots x_N$ de la variable aléatoire X et ce sont ces réalisations qui nous permettront d'estimer $\mathbb{E}(X)$ d'une part, et de caractériser le niveau d'incertitude de cette estimation, d'autre part.

Dans cet exemple la variable aléatoire W (le poids de Monte Carlo) est tout simplement X . On dispose donc de

N réalisations $w_1 = x_1, w_2 = x_2 \dots w_N = x_N$ de W et on les utilise pour calculer

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i \quad (14)$$

et

$$s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i^2 \right) - m^2} \quad (15)$$

Le tableau ci-dessous donne six exemples d'estimation pour des valeurs de N de plus en plus élevées :

N	m	s
1	1	0
10	0.6	0.154919
100	0.41	0.0491833
1000	0.507	0.0158098
10000	0.5016	0.00499997
100000	0.49902	0.00158114

Ces calculs ont été effectués à l'aide du programme `pile_face.c` reporté ci-dessous. Il est codé en langage C. La présentation de ce programme fait appel aux concepts de la programmation lettrée. La compilation s'effectue avec la commande suivante (dans un shell unix, l'utilisateur étant `lafrier`) :

```
lafrier$ gcc pile_face.c -lgsl -lgslcblas -lm
```

8

```
<pile_face.c 8>≡
<copyright ??>
<licence ??>
<inclusion des bibliothèques usuelles ??>
<inclusion de la gsl ??>
int main()
{
    <déclaration du générateur de nombres aléatoires de la gsl ??>
    int N;
    double r;
    double w, sum_w, sum_w2;
    double m, s;
    /* nombre de réalisations */
    N = 10000;
    /* initialisation du compteur de la somme des poids */
    sum_w = 0.;
    /* initialisation du compteur de la somme des carrés des poids */
    sum_w2 = 0.;
    for (int i=0; i<N; ++i) /* boucle sur les réalisations */
    {
        /* tirage uniforme sur [0,1] */
        r = gsl_rng_uniform(random_generator);
        if ( r < 0.5 ) /* coté pile */
        {
            w = 0;
        }
        else /* coté face */
        {
            w = 1;
        }
        sum_w = sum_w + w;
        sum_w2 = sum_w2 + w*w;
    }
    /* calcul de l'estimateur */
    m=sum_w/N;
    /* calcul de l'incertitude */
    s=sqrt( (sum_w2/N-m*m)/N );
}
```

```

/* affichage du résultat */
printf("moyenne = %g +/- %g\n", m, s);
<libération de la mémoire du générateur de nombres aléatoires de la gsl ??>
return 0;
}

```

Comme dans cet exemple simple nous connaissons la solution exacte ($\mathbb{E}(X) = 0.5$), en regardant les résultats reportés dans le tableau, nous pouvons vérifier que s est bien un indicateur fiable du niveau d'incertitude de l'estimateur m : à l'exception du calcul lancé avec un seul échantillon (qui ne fait aucun sens), on observe bien effectivement que $\mathbb{E}(X) \in [m - 3s, m + 3s]$. Cependant dans la pratique, ne connaissant pas la solution exacte, nous ne ferions confiance aux résultats que pour $N > 1000$. Les estimateurs produits avec 10 et 100 réalisations affichent une incertitude relative qui serait jugée trop importante : on craindrait que l'estimation de l'incertitude soit trop incertaine (que l'incertitude soit fautive). Le fait que s soit élevé n'est pas un problème dans l'absolu : il y a de nombreux contextes où il n'est pas nécessaire d'avoir une précision élevée. Mais il faut la connaître. Si s n'est pas un bon estimateur de l'écart type de l'estimateur, alors l'incertitude n'est pas connue il est possible que $\mathbb{E}(X) \notin [m - 3s, m + 3s]$. Le résultat du calcul Monte Carlo doit alors être rejeté : sans incertitude associée, il est inexploitable.

Ici (ou dans le contexte plus appliqué d'un sondage lors du second tour d'une élection présidentielle) l'incertitude peut être prédite théoriquement. En effet, nous verrons plus tard que l'incertitude de l'estimateur est $\frac{1}{\sqrt{N}}\sigma(W)$ où $\sigma(W)$ est l'écart type de la variable aléatoire poids. Or le poids prend soit la valeur 0 soit la valeur 1 et on peut donc affirmer que $W^2 = W$. Ainsi $\sigma^2(W) = \mathbb{E}(W^2) - \mathbb{E}(W)^2 = \mathbb{E}(W)(1 - \mathbb{E}(W))$. L'espérance des poids étant 0.5, on obtient $\sigma^2(W) = 0.5(1 - 0.5) = 0.25$ et donc $\sigma(W) = 0.5$, ce qui permet de conclure que l'incertitude de l'estimateur est $\frac{0.5}{\sqrt{N}}$. Pour 1000 jets de pièce (ou pour un sondage sur 1000 personnes) on obtient que l'incertitude de l'estimateur est $\frac{0.5}{\sqrt{1000}} = 0.01581$, ce qui est bien confirmé par la valeur de s pour $N = 1000$ dans le tableau de résultats. Dans le cas d'un sondage, on parlerait d'une incertitude statistique de 1.5%, sachant que cette incertitude ne peut s'interpréter qu'en termes d'intervalle de confiance, par exemple en affirmant que la probabilité que l'estimateur (le sondage) soit faux de $3 \times 1.5\% = 4.5\%$ est $1 - 0.996$, soit 0.004.

2.1.3 Lecture probabiliste de la physique du rayonnement

Avant de poursuivre, rappelons quelques éléments de la physique du rayonnement en les présentant sous un angle probabiliste. Ce sont ces éléments qui nous serviront de point de départ dans les algorithmes de Monte Carlo *analogues*, au sens où nous l'avons défini dans la section précédente.

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

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

Nous décrivons complètement les variables aléatoires correspondantes, mais nous ne donnons pas les techniques numériques utilisées communément pour réaliser ces variables aléatoires (produire des échantillons). Ces techniques sont déjà bien décrites dans tous les livres de cours abordant la méthode de Monte Carlo dans un contexte radiatif et de plus tous les environnements de programmation actuels dédiés à la méthode de Monte Carlo incluent des bibliothèques permettant ces échantillonnages. Comprendre la théorie de l'échantillonnage n'est donc pas un besoin de premier niveau.

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

$$p_{\Omega}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \quad (16)$$

Emission d'un volume d'extension finie La puissance radiative émise par un volume V d'extension finie est la somme des émissions locales, soit $\phi_v^{e,v}(V) = \int_V \varphi_v^{e,v}(\mathbf{x})d\mathbf{x}$. L'évènement statistique correspondant à l'émission de l'un des photons

responsables de cette émission est entièrement défini par la position \mathbf{x} à laquelle le photon a été émis par la matière et par la direction ω prise par ce photon. Comme précédemment, la direction est distribuée de façon isotrope, soit

$$p_{\Omega}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \quad (17)$$

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

$$p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,v}(\mathbf{x})}{\phi_{\nu}^{e,v}(V)} \quad (18)$$

Emission d'une surface élémentaire La densité surfacique de puissance radiative émise en un point \mathbf{x} d'une surface de normale \mathbf{n} , d'émissivité directionnelle $\epsilon_{\nu}(\omega, \mathbf{x})$ et de température $T(\mathbf{x})$ est $\varphi_{\nu}^{e,s}(\mathbf{x}) = \pi \epsilon_{\nu}^h(\mathbf{x}) L_{\nu}^0(T(\mathbf{x}))$ où $\epsilon_{\nu}^h(\mathbf{x}) = \int_{2\pi} d\omega \frac{\omega \cdot \mathbf{n}}{\pi} \epsilon_{\nu}(\omega, \mathbf{x})$ est l'émissivité hémisphérique. La distribution des directions d'émission des photons correspondants sur l'hémisphère sortant $h(\mathbf{x})$ est

$$p_{\Omega}(\omega) = \frac{\epsilon_{\nu}(\omega, \mathbf{x})}{\epsilon_{\nu}^h(\mathbf{x})} \frac{\omega \cdot \mathbf{n}}{\pi} \quad (19)$$

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

$$p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \frac{\varphi_{\nu}^{e,s}(\mathbf{x})}{\phi_{\nu}^{e,s}(S)} \quad (20)$$

et comme précédemment, la direction est distribuée selon

$$p_{\Omega}(\omega) = \frac{\epsilon_{\nu}(\omega, \mathbf{x})}{\epsilon_{\nu}^h(\mathbf{x})} \frac{\omega \cdot \mathbf{n}}{\pi} \quad (21)$$

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

$$P_{abs} = \epsilon_{\nu}(-\omega_c, \mathbf{y}) \quad (22)$$

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

$$p_{\Omega}(\omega|\omega_c; \mathbf{y}) = (\omega \cdot \mathbf{n}) \rho_{\nu}(\omega, \omega_c, \mathbf{y}) \quad (23)$$

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

$$\frac{p_{\Omega}(\omega|\omega_c; \mathbf{y})}{\omega \cdot \mathbf{n}} = \frac{p_{\Omega}(-\omega_c|-\omega; \mathbf{y})}{-\omega_c \cdot \mathbf{n}} \quad (24)$$

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

$$\tau_{seg} = \int_{[\mathbf{x}_c, \mathbf{y}]} (\kappa_{av}(z) + \kappa_{dv}(z)) dz$$

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

$$P_{col} = 1 - \exp(-\tau_{seg}) \quad (25)$$

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

$$p_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}; \mathbf{x}_c, \omega_c) = \frac{(\kappa_{av}(\mathbf{z}) + \kappa_{dv}(\mathbf{z})) \exp(-\tau(\mathbf{z}))}{P_{col}} \quad (26)$$

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

$$P_{abs} = \frac{\kappa_{av}(\mathbf{z})}{\kappa_{av}(\mathbf{z}) + \kappa_{dv}(\mathbf{z})} \quad (27)$$

Si le photon n'est pas absorbé, il est diffusé dans une direction ω dont la densité de probabilité est simplement la fonction de phase $p_{\Omega, \nu}^d(\omega | \omega_c, \mathbf{z})$:

$$p_{\Omega}(\omega | \omega_c; \mathbf{z}) = p_{\Omega, \nu}^d(\omega | \omega_c, \mathbf{z}) \quad (28)$$

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

$$\hat{\kappa}_{dv}(\mathbf{z}) = \kappa_{dv}(\mathbf{z}) + \kappa_{nv}(\mathbf{z}) \quad (29)$$

et la fonction de phase devient

$$\hat{p}_{\Omega, \nu}^d(\omega, \omega_c, \mathbf{z}) = \frac{\kappa_{dv}(\mathbf{z}) p_{\Omega, \nu}^d(\omega, \omega_c, \mathbf{z}) + \kappa_{nv}(\mathbf{z}) \delta(\omega - \omega_c)}{\kappa_{dv}(\mathbf{z}) + \kappa_{nv}(\mathbf{z})} \quad (30)$$

où δ est la fonction Dirac qui traduit le fait qu'après une collision nulle $\omega = \omega_c$. Le coefficient d'absorption est inchangé :

$$\hat{\kappa}_{av}(\mathbf{z}) = \kappa_{av}(\mathbf{z}) \quad (31)$$

Les probabilités et densités de probabilité définies au paragraphe précédent sont alors obtenues en utilisant ces grandeurs modifiées, le principal intérêt pratique étant que l'on peut ajuster le champ de κ_{nv} (choisir la distribution spatiale des collisions nulles) de façon à simplifier la distribution des positions de collision et permettre un échantillonnage efficace de $p_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}; \mathbf{x}_c, \omega_c)$.

2.1.4 Intégration directionnelle du transport sans récursivité (sans diffusion, sans réflexion)

Dans le premier exemple que nous avons abordé dans la section 2.1.1, même s'il s'agissait d'illustrer le transport pur (pas d'émission/absorption volumique, pas de diffusion), nous étions déjà confrontés à une intégration directionnelle. Le rayonnement émis par la surface \mathcal{S}_0 était émis dans toutes les directions de l'hémisphère et la puissance échangée $\phi(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ résultait bien d'une somme sur toutes ces directions. Nous retrouverons une image très similaire lorsque nous nous intéresserons aux émissions volumiques, qui auront lieu dans toutes les directions de la sphère unité.

Dans cette section, nous allons effectivement ajouter ces émissions en volume, ainsi que les absorptions en volume, mais nous continuons à laisser de côté la diffusion. L'équation de transfert radiatif devient donc

$$\omega \cdot \mathbf{grad}_{\mathbf{x}} L_{\nu} = \kappa_{av} L_{\nu}^0(T) - \kappa_{av} L_{\nu} \quad (32)$$

Nous allons aussi commencer à systématiser la construction des algorithmes en considérant tous les types d'échanges : entre deux volumes, entre un volume et une surface, entre deux surfaces.

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

$\phi_\nu(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ est une puissance et non un transfert d'énergie associé à un nombre défini de photons. Pour autant, il est tout-à-fait possible de faire appel aux images physiques que nous avons introduites dans les sections précédentes pour construire tout un ensemble d'algorithmes de Monte Carlo très divers sur une base essentiellement intuitive : il suffit de partir de l'image de photons qui sont les propagateurs de la puissance $\phi_\nu^e(\mathcal{A})$ émise par \mathcal{A} . Nous avons déjà insisté sur l'idée que l'on fait alors porter à chaque photon l'intégralité de la puissance émise et on génère aléatoirement une trajectoire pour ce photon selon les lois statistiques d'émission, et maintenant aussi d'absorption en volume. Si l'absorption a lieu au sein de \mathcal{B} , le poids associé à ce photon est $w = \phi_\nu^e(\mathcal{A})$, sinon $w = 0$. La puissance recherchée $\phi_\nu(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ est alors simplement la moyenne de ces poids. Encore une fois, pour chaque photon, on raisonne donc comme s'il était l'unique propagateur de la puissance émise par \mathcal{A} , puis on prend la moyenne sur l'ensemble des trajectoires de photons. Nous verrons assez rapidement que cette approche peut ensuite être très légèrement modifiée pour aborder une famille d'algorithmes dans lesquels le poids associé au photon dépend de chaque photon (notamment de sa position et de sa direction d'émission) et évolue au cours de la trajectoire. La conception de tels algorithmes demande plus de rigueur, mais il s'agit encore d'algorithmes analogues ne demandant aucun travail formel. Bien sûr, plus on augmente la complexité de l'algorithme, plus on est conduit à douter qu'une approche purement intuitive suffise à garantir l'exactitude des résultats numériques obtenus. C'est pourtant le principal atout de la méthode de Monte Carlo. La pratique montre en effet que l'on peut pousser très loin le niveau de complexité physique et algorithmique sur une base purement intuitive, avec seulement une bonne maîtrise de la physique du rayonnement dans son interprétation statistique (à ce stade distributions des positions et des directions d'émission, distribution des lieux des absorptions dans le milieu, plus tard probabilité qu'une collision en volume soit une diffusion, etc). Bien sûr, même pour un physicien très habitué à cette pensée statistique il reste parfois nécessaire de passer par une étape de validation plus rigoureuse. Nous verrons alors qu'il existe une procédure systématique de formulation intégrale qui permet de s'assurer, a posteriori, qu'un algorithme conçu "intuitivement" évalue bien la grandeur recherchée (section 3.1.1). Mais pour l'instant, comme annoncé, nous en restons aux images les plus simples, en milieu non diffusant et sans réflexion.

Les algorithmes présentés dans cette section évaluent tous $A = \phi_\nu(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ en utilisant N photons avec le même fondement algorithmique : l'algorithme 1 que nous avons introduit dans la section précédente. Chaque exemple ne se distingue que par l'algorithme de suivi du photon et de calcul du poids associé. Lors de la description de ces algorithmes nous utiliserons les notations suivantes :

- \mathbf{x}_0 et $\boldsymbol{\omega}_0$ sont respectivement la position et la direction d'émission.
- \mathbf{y}_0 est la première intersection avec la paroi de la demi-droite issue de \mathbf{x}_0 dans la direction $\boldsymbol{\omega}_0$.
- Dans le cas où une absorption a lieu dans le milieu (avant que le photon ne rencontre la paroi), \mathbf{z}_0 est la position de cette absorption.
- Quand on souhaite représenter la position de la prochaine collision indépendamment de son type (\mathbf{y}_0 pour une collision à la paroi, \mathbf{z}_0 pour une collision dans le volume), on utilise la notation \mathbf{x}_1 . On aura donc toujours soit $\mathbf{x}_1 = \mathbf{y}_0$ soit $\mathbf{x}_1 = \mathbf{z}_0$.

On suppose que la paroi de l'enceinte est noire. Il n'y a donc ni réflexion pariétale ni diffusion et les photons se déplacent en ligne droite depuis leur position d'émission jusqu'à leur position d'absorption, à la paroi ou dans le volume.

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

Dans ce premier exemple, le milieu est homogène, donc le coefficient d'absorption $\kappa_{av}(\mathbf{x})$ est indépendant de \mathbf{x} . Le volume \mathcal{V}_0 est isotherme et on note T_0 sa température. On cherche à évaluer $A = \phi_\nu(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. On construit ci-dessous, étape par étape, l'algorithme donné dans la figure 1 à partir des images physiques introduites dans la section 2.1.3. Dans la même figure, l'algorithme est également traduit sous la forme d'une intégrale évaluant $A = \phi_\nu(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$ car nous nous servirons de ce type d'intégrales à partir de la section 3.1.

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

$$\phi_\nu^{e,v}(\mathcal{V}_0) = \int_{\mathcal{V}_0} \varphi_\nu^{e,v}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_\nu^0(T_0)$$

Algorithmiquement, le poids associé à chaque photon sera égal à cette puissance, soit $w = \phi_\nu^{e,v}(\mathcal{V}_0) = 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_\nu^0(T_0)$ si le photon est finalement absorbé par le volume \mathcal{V}_1 , et $w = 0$ sinon.

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

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

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

$$p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0) = \frac{\varphi_\nu^{e,v}(\mathbf{x}_0)}{\phi_\nu^{e,v}(\mathcal{V}_0)} = \frac{4\pi\kappa_{av}L_\nu^0(T_0)}{4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_\nu^0(T_0)} = \frac{1}{\mathcal{V}_0}$$

c'est-à-dire de façon uniforme (car \mathcal{V}_0 est à la fois homogène et isotherme). Pour chaque photon, ω_0 et \mathbf{x}_0 sont donc générés aléatoirement selon ces deux distributions et définissent un rayon qui intersecte la paroi en \mathbf{y}_0 .

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

$$\tau_{seg} = \int_{[\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0]} (\kappa_{av}(\mathbf{z}) + \kappa_{dv}(\mathbf{z})) d\mathbf{z} = \kappa_{av} \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|$$

La probabilité que le photon collisionne avant la paroi est donc

$$P_{col} = 1 - \exp(-\tau_{seg}) = 1 - \exp(-\kappa_{av} \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|)$$

Si la collision a lieu, c'est une absorption (car le milieu est non diffusant) et sa position \mathbf{z}_0 est distribuée le long du rayon selon la densité de probabilité

$$p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) = \frac{(\kappa_{av}(\mathbf{z}_0) + \kappa_{dv}(\mathbf{z}_0)) \exp(-\tau(\mathbf{z}_0))}{P_{col}} = \frac{\kappa_{av} \exp(-\kappa_{av} \|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\|)}{1 - \exp(-\kappa_{av} \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|)}$$

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

En pratique, pour déterminer le lieu et le type de la prochaine collision l'algorithme communément retenu est plus simple. On imagine que le rayon est infini : il se poursuit virtuellement après la paroi comme si la paroi était remplacée par un milieu semi-infini (toujours non diffusant et de coefficient d'absorption κ_{av}). La trajectoire du photon se termine donc toujours par une absorption "en volume", en un point \mathbf{z}_0 distribué sur la demi-droite $\mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \omega_0)$ issue de \mathbf{x}_0 dans la direction ω_0 , selon la densité de probabilité

$$p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) = \kappa_{av} \exp(-\kappa_{av} \|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\|) \quad (33)$$

Cette densité de probabilité est la même que précédemment, mais la paroi est ici virtuellement reportée à l'infini. On génère alors aléatoirement une position d'absorption dans cette nouvelle configuration et on regarde si cette absorption est située avant ou après la paroi effective ($\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\|$ inférieur ou supérieur à $\|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|$). Si elle est située avant, elle est retenue comme une absorption effective : $\mathbf{x}_1 = \mathbf{z}_0$. Si elle est située après, on retient que le photon a rencontré la paroi : $\mathbf{x}_1 = \mathbf{y}_0$.

La dernière étape consiste à déterminer si \mathbf{x}_1 est situé dans le volume \mathcal{V}_1 . Si la collision est à la paroi ($\mathbf{x}_1 = \mathbf{y}_0$) alors elle ne peut pas être située dans l'élément de volume \mathcal{V}_1 et le poids de Monte Carlo est donc $w = 0$. Si la collision est en volume, alors soit \mathbf{x}_1 est situé dans le volume \mathcal{V}_1 et $w = \phi_v^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon $w = 0$. Pour représenter ces tests dans les formulations intégrales de la section 3.1, on introduira une fonction \hat{w} permettant d'écrire $w = \hat{w}(\mathbf{z}_0)$, avec $\hat{w}(\mathbf{z}_0) = \mathcal{H}(\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|) \mathcal{H}(\mathbf{z}_0 \in \mathcal{V}_1) \phi_v^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, où $\mathcal{H}(test)$ prend la valeur 1 si $test$ est vrai et 0 sinon.

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

On cherche à évaluer $A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{S}_1)$ sachant que \mathcal{V}_0 est isotherme, à la température T_0 , et que le milieu est homogène. L'algorithme employé est décrit dans la figure 2. Il est identique à celui de l'exemple 1. Seul le dernier test diffère : si \mathbf{x}_1 est situé sur la surface \mathcal{S}_1 alors $w = \phi_v^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon $w = 0$.

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

On cherche à évaluer $A = \phi_v(\mathcal{S}_0, \mathcal{V}_1)$ sachant que \mathcal{S}_0 est noire, isotherme à la température T_0 , et que le milieu est homogène. L'algorithme employé est décrit dans la figure 3.

- *Le poids* : Comme la surface est noire et isotherme, en tout point \mathbf{x} de \mathcal{S}_0 et pour toutes les directions ω de l'hémisphère sortant on a $\epsilon_v(\omega, \mathbf{x}) = 1$ et $T(\mathbf{x}) = T_0$. La densité surfacique de puissance radiative émise en \mathbf{x} est donc $\varphi_v^{e,s}(\mathbf{x}) = \pi \epsilon_v^h(\mathbf{x}) L_v^0(T(\mathbf{x})) = \pi L_v^0(T_0)$ et la puissance émise par \mathcal{S}_0 devient (voir la section 2.1.3)

$$\phi_v^{e,s}(\mathcal{S}_0) = \int_{\mathcal{S}_0} \varphi_v^{e,s}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \pi \mathcal{S}_0 L_v^0(T_0)$$

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

— *Direction et position d'émission* : La position d'émission d'un photon, \mathbf{x}_0 , est distribuée sur \mathcal{S}_0 selon

$$p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0) = \frac{\varphi_v^{e,s}(\mathbf{x}_0)}{\phi_v^{e,s}(\mathcal{S}_0)} = \frac{1}{\mathcal{S}_0}$$

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

$$p_{\Omega_0}(\boldsymbol{\omega}_0) = \frac{\epsilon_v(\boldsymbol{\omega}, \mathbf{x})}{\epsilon_v^h(\mathbf{x})} \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}}{\pi} = \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}}{\pi}$$

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

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

On cherche à évaluer $A = \phi_v(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ sachant que \mathcal{S}_0 est noire et isotherme, à la température T_0 , et que le milieu est homogène. L'algorithme employé est décrit dans la figure 4. Il est identique à celui de l'exemple 3. Seul le dernier test diffère : si \mathbf{x}_1 est situé sur la surface \mathcal{S}_1 alors $w = \phi_v^{e,v}(\mathcal{V}_0)$, sinon $w = 0$. On retrouve alors exactement l'algorithme que nous avons décrit dans la section 2.1.1.

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

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

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

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

$$p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0) = \frac{\varphi_v^{e,v}(\mathbf{x}_0)}{\phi_v^{e,v}(\mathcal{V}_0)} = \frac{4\pi\kappa_{av}L_v^0(T(\mathbf{x}_0))}{4\pi\kappa_{av}\int_{\mathcal{V}_0}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x}} = \frac{L_v^0(T(\mathbf{x}_0))}{\int_{\mathcal{V}_0}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x}}$$

— le poids, qui était $w = 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_v^0(T_0)$ dans le cas isotherme, et qui deviendrait

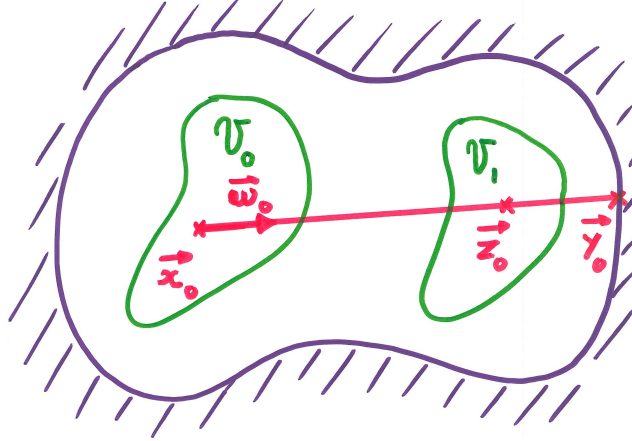
$$w = \phi_v^{e,v}(\mathcal{V}_0) = \int_{\mathcal{V}_0}\varphi_v^{e,v}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int_{\mathcal{V}_0}4\pi\kappa_{av}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x} = 4\pi\kappa_{av}\int_{\mathcal{V}_0}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x}$$

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

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

$$\tilde{w} = w \frac{p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}{\tilde{p}_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)} = 4\pi\kappa_{av}\int_{\mathcal{V}_0}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x} \frac{L_v^0(T(\mathbf{x}_0))}{\int_{\mathcal{V}_0}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x}} = 4\pi\kappa_{av}L_v^0(T(\mathbf{x}_0)) \frac{1}{\tilde{p}_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}$$

Le rapport $\frac{p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}{\tilde{p}_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}$ compense rigoureusement le biais d'échantillonnage et le produit $w p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)$ fait disparaître l'intégrale $\int_{\mathcal{V}_0}L_v^0(T(\mathbf{x}))d\mathbf{x}$ qui posait le problème d'être inconnue. Mais le nouveau poids dépend de \mathbf{x}_0 et à travers l'échantillonnage des positions, les variations de ce poids permettront de reconstruire l'information manquante (la puissance totale émise par \mathcal{V}_0). Un tel algorithme biaisé reste très intuitif : lorsque $\tilde{p}_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)$ est inférieur à $p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)$, la position \mathbf{x}_0 est sous-échantillonnée d'un facteur $\frac{\tilde{p}_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}{p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}$ et on compense simplement ce biais d'échantillonnage en accordant au photons partant de \mathbf{x}_0 un poids augmenté du facteur inverse $\frac{p_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}{\tilde{p}_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{x}_0)}$. Nous retrouverons cette technique en réponse à des objectifs d'optimisation de convergence et surtout nous en justifierons pleinement la rigueur, dans la section 3.1, à partir de manipulations intégrales très simples. Elle fait partie des techniques nécessaires à une utilisation minimum de la méthode de Monte Carlo. L'algorithme correspondant à la première utilisation que nous venons d'en faire est décrit dans la figure 5.



Algorithme :

```

Echantillonnage de la position d'émission  $x_0$  uniformément dans  $\mathcal{V}_0$ ;
Echantillonnage de la direction d'émission  $\omega_0$  de façon isotrope;
Echantillonnage de la position d'absorption  $z_0$  selon la loi de Beer;
if  $z_0$  est dans l'enceinte then
  if  $z_0$  est dans  $\mathcal{V}_1$  then
     $w = 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_v^0(T_0)$ ;
  else
     $w = 0$ ;
  end
else
   $w = 0$ ;
end

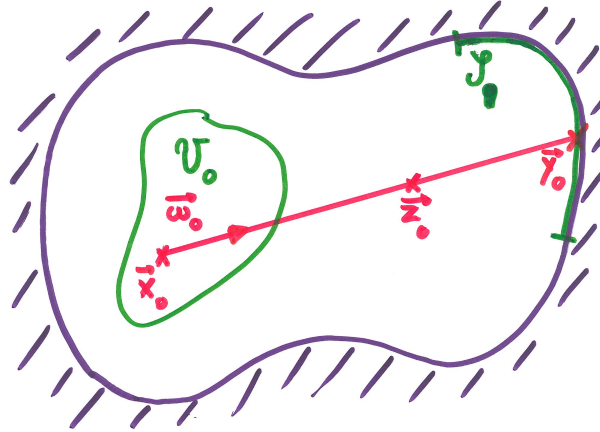
```

Formulation intégrale :

$$\phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1) = \int_{\mathcal{V}_0} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{4\pi} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \int_{\mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \omega_0)} p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) dz_0 \hat{w}(\mathbf{z}_0)$$

$$\hat{w}(\mathbf{z}_0) = \mathcal{H}(\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|) \mathcal{H}(\mathbf{z}_0 \in \mathcal{V}_1) 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_v^0(T_0)$$

FIGURE 1 – Algorithme de génération aléatoire du poids w pour l'exemple 1, à combiner avec l'algorithme 1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Algorithme :

```

Echantillonnage de la position d'émission  $x_0$  uniformément dans  $\mathcal{V}_0$ ;
Echantillonnage de la direction d'émission  $\omega_0$  de façon isotrope;
Echantillonnage de la position d'absorption  $z_0$  selon la loi de Beer;
if  $z_0$  est dans l'enceinte then
  |  $w = 0$ ;
else
  | if  $y_0$  est dans  $\mathcal{S}_1$  then
  | |  $w = 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_v^0(T_0)$ ;
  | else
  | |  $w = 0$ ;
  | end
end

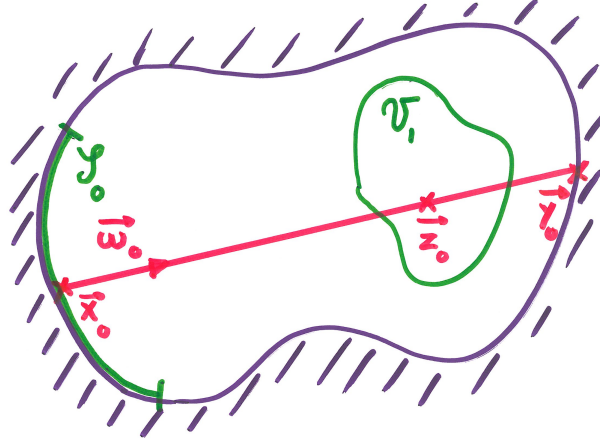
```

Formulation intégrale :

$$\phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{S}_1) = \int_{\mathcal{V}_0} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{4\pi} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \int_{\mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \omega_0)} p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) dz_0 \hat{w}(\mathbf{z}_0)$$

$$\hat{w}(\mathbf{z}_0) = \mathcal{H}(\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\| > \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|) \mathcal{H}(\mathbf{y}_0 \in \mathcal{S}_1) 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_v^0(T_0)$$

FIGURE 2 – Algorithme de génération aléatoire du poids w pour l'exemple 2, à combiner avec l'algorithme 1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{S}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Algorithme :

```

Echantillonnage de la position d'émission  $x_0$  uniformément sur  $S_0$ ;
Echantillonnage de la direction d'émission  $\omega_0$  de façon lambertienne;
Echantillonnage de la position d'absorption  $z_0$  selon la loi de Beer;
if  $z_0$  est dans l'enceinte then
  if  $z_0$  est dans  $\mathcal{V}_1$  then
     $w = \pi S_0 L_v^0(T_0)$ ;
  else
     $w = 0$ ;
  end
else
   $w = 0$ ;
end

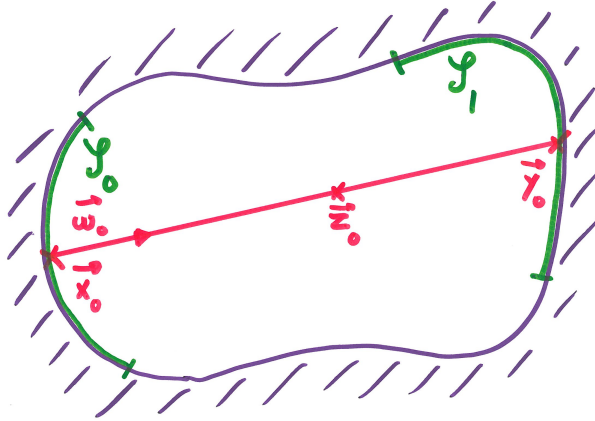
```

Formulation intégrale :

$$\phi_v(S_0, \mathcal{V}_1) = \int_{S_0} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{h(\mathbf{x}_0)} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \int_{\mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \omega_0)} p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) dz_0 \hat{w}(\mathbf{z}_0)$$

$$\hat{w}(\mathbf{z}_0) = \mathcal{H}(\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|) \mathcal{H}(\mathbf{z}_0 \in \mathcal{V}_1) \pi S_0 L_v^0(T_0)$$

FIGURE 3 – Algorithme de génération aléatoire du poids w pour l'exemple 3, à combiner avec l'algorithme 1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(S_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Algorithme :

```

Echantillonnage de la position d'émission  $x_0$  uniformément sur  $S_0$ ;
Echantillonnage de la direction d'émission  $\omega_0$  de façon lambertienne;
Echantillonnage de la position d'absorption  $z_0$  selon la loi de Beer;
if  $z_0$  est dans l'enceinte then
  |  $w = 0$ ;
else
  | if  $y_0$  est dans  $S_1$  then
  | |  $w = \pi S_0 L_v^0(T_0)$ ;
  | else
  | |  $w = 0$ ;
  | end
end

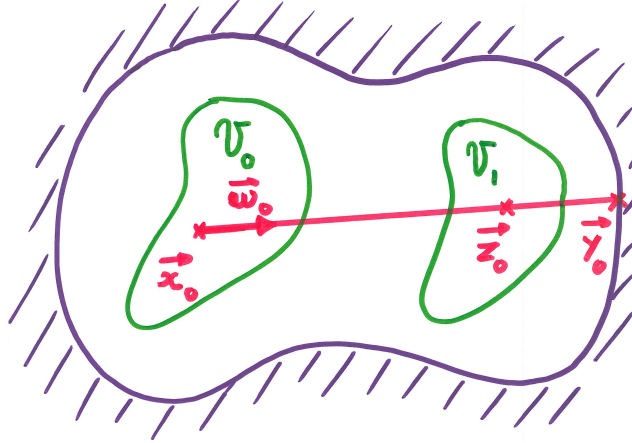
```

Formulation intégrale :

$$\phi_v(S_0, S_1) = \int_{S_0} p_{X_0}(x_0) dx_0 \int_{h(x_0)} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \int_{\mathcal{R}(x_0, \omega_0)} p_{Z_0}(z_0; x_0, \omega_0) dz_0 \hat{w}(z_0)$$

$$\hat{w}(z_0) = \mathcal{H}(\|z_0 - x_0\| > \|y_0 - x_0\|) \mathcal{H}(y_0 \in S_1) \pi S_0 L_v^0(T_0)$$

FIGURE 4 – Algorithme de génération aléatoire du poids w pour l'exemple 4, à combiner avec l'algorithme 1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(S_0, S_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids en fonction de la position d'absorption.



Algorithme :

Echantillonnage de la position d'émission \mathbf{x}_0 selon $\tilde{p}_{\mathbf{x}_0}$ dans \mathcal{V}_0 , par exemple de façon uniforme, i.e. $\tilde{p}_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{\mathcal{V}_0}$;

Echantillonnage de la direction d'émission ω_0 de façon isotrope;

Echantillonnage de la position d'absorption \mathbf{z}_0 selon la loi de Beer;

if \mathbf{z}_0 est dans l'enceinte **then**

if \mathbf{z}_0 est dans \mathcal{V}_1 **then**

$w = 4\pi\kappa_{av}L_v^0(T(\mathbf{x}_0))\frac{1}{\tilde{p}_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0)}$;

else

$w = 0$;

end

else

$w = 0$;

end

Formulation intégrale :

$$\phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1) = \int_{\mathcal{V}_0} \tilde{p}_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{4\pi} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \int_{\mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \omega_0)} p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) dz_0 \hat{w}(\mathbf{z}_0)$$

$$\hat{w}(\mathbf{z}_0) = \mathcal{H}(\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0\|) \mathcal{H}(\mathbf{z}_0 \in \mathcal{V}_1) 4\pi\kappa_{av}L_v^0(T(\mathbf{x}_0)) \frac{1}{\tilde{p}_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0)}$$

FIGURE 5 – Algorithme de génération aléatoire du poids w pour l'**exemple 5**, à combiner avec l'algorithme **1** (en remplaçant w par \hat{w}) pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante, où \hat{w} donne la valeur du poids \hat{w} en fonction de la position d'absorption.

2.1.5 Terme d'intégration directionnelle

Dans la section précédente, nous nous sommes intéressés seulement à l'intégration angulaire venant de l'émission (émissions volumiques isotropes, émissions surfaciques souvent lambertiennes). Le second membre de l'équation de transfert radiatif ne comportait toujours pas d'intégrale angulaire. Ici nous allons décrire deux nouvelles intégrations angulaires : celle associée à la partie diffusif de l'opérateur de collision en volume (le terme diffusif de l'équation de transfert radiatif, i.e. une somme sur toutes les directions entrantes de la sphère unité) et celle associée à la partie réflexion de la condition à la limite (une somme sur toutes les directions entrantes de l'hémisphère autour de la normale à la paroi). L'équation de transfert radiatif est donc maintenant complète, avec tout son second membre,

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu = -\kappa_{e\nu} L_\nu + \kappa_{a\nu} L_\nu^0(T) + \kappa_{d\nu} \int_{4\pi} d\omega' L'_\nu p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') \quad (34)$$

et sa condition à la limite tient compte d'éventuelles propriétés de réflexion,

$$L_\nu = \epsilon_\nu(\boldsymbol{\omega}) L_\nu^0(T) + \int_{2\pi} d\omega' L'_\nu |\boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{n}| \rho_\nu(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') \quad (35)$$

Dans la littérature sur la méthode de Monte Carlo, les intégrales angulaires qui apparaissent dans ces deux équations sont regroupées sous la dénomination *collision* : collisions en volume, collisions pariétales. Comme pour le transport pur, la pratique initiale de Monte Carlo ne part pas de l'équation de transfert radiatif elle-même, ni du formalisme de sa condition à la limite. Il s'agit bien de résoudre l'équation de transfert radiatif, mais pour cela on repart de l'énoncé du modèle physique du transport de photons qui a permis la construction de l'équation de transfert radiatif. On part de la physique en amont de cette équation et pas de l'équation elle-même. Il y a bien sûr de nombreux contre-exemples et certains auteurs prennent au contraire l'équation de transfert radiatif comme point de départ, notamment en la transformant en une équation de Fredholm de seconde espèce puis en utilisant un développement de Neumann (technique du noyau itéré). Mais dans les premières années de la méthode (et encore aujourd'hui) ces pratiques restent très marginales. Nous allons donc continuer notre présentation sur une base intuitive car c'est en ces termes que sont présentés la plupart des algorithmes existants. Le lecteur qui souhaite prendre la mesure de toute l'ampleur des recherches ayant eu comme objectif au contraire, dès les années 50, de dépasser ces approches intuitives (dépasser ce que nous avons appelé les *approches analogues*) est invité à lire le merveilleux petit livre de Hammersley et Handscomb : "Monte Carlo Methods" [5].

Pour poursuivre notre choix d'une introduction par l'exemple et aborder ces nouvelles questions d'intégration angulaire, nous allons nous intéresser à une configuration dans laquelle le milieu n'est plus seulement absorbant et émetteur, mais est également diffusant, et par contre nous continuerons à utiliser des parois noires. Les algorithmes avec réflexions sont en effet très proches des algorithmes avec diffusion. Nous ne ferons donc qu'évoquer cette question du traitement des réflexions pariétales et elle pourra ensuite être l'objet d'un exercice de TP.

Exemple 6 reprise de l'exemple 1 avec diffusion

On reprend l'exemple 1 en tenant compte de la diffusion. Le milieu est homogène, donc le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion et la fonction de phase sont indépendants de la position. Le volume \mathcal{V}_0 est isotherme et on note T_0 sa température. On cherche à évaluer $A = \phi_\nu(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. L'algorithme employé est décrit dans la figure 6.

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

$$p_{\mathcal{Z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\omega}_0) = (\kappa_{a\nu} + \kappa_{d\nu}) \exp(-(\kappa_{a\nu} + \kappa_{d\nu})\|\mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0\|)$$

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

- *Absorption ou diffusion* : Si \mathbf{x}_1 est situé à la paroi, alors le photon est absorbé (car la paroi est noire) et $w = 0$. Si \mathbf{x}_1 est situé dans le volume \mathcal{V} , alors la collision correspondante est une absorption avec une probabilité $P_{abs} = \frac{\kappa_{a\nu}}{\kappa_{a\nu} + \kappa_{d\nu}}$. Dans le cas contraire c'est une diffusion et le photon repart de la position \mathbf{x}_1 dans une nouvelle direction $\boldsymbol{\omega}_1$, distribuée selon $p_{\Omega_1}(\boldsymbol{\omega}_1|\boldsymbol{\omega}_0)$, jusqu'à la prochaine collision, etc. Lorsque le photon est absorbé dans le volume intérieur de l'enceinte, la dernière étape consiste à déterminer si la position d'absorption est située dans le volume \mathcal{V}_1 . Si c'est le cas, alors $w = \phi_\nu^{e, \nu}(\mathcal{V}_0)$, sinon $w = 0$.

Les autres exemples avec diffusion Concevoir des algorithmes du même type pour reprendre les exemples 2, 3, 4 et 5 avec diffusion ne pose aucune difficulté.

Les réflexions La prise en compte des réflexions est également très simple : il suffit de mettre en œuvre les probabilités d'absorption et de réflexion introduites dans la section 2.1.3. Lorsque le photon est absorbé à la paroi, le poids de Monte Carlo est calculé de la même façon que précédemment, et lorsque le photon est réfléchi, la direction de réflexion est choisie selon la densité de probabilité rappelée dans la section 2.1.3 (en fonction de la réflectivité directionnelle-directionnelle) et l'algorithme se poursuit comme pour un algorithme de diffusion multiple.

Les algorithmes à collisions nulles Nous avons traité un exemple d'anisothermie et nous avons vu que cela se traduit simplement par un poids de Monte Carlo qui dépend de la température du point d'émission. Par contre nous n'avons rien dit sur les hétérogénéités. Lorsqu'un milieu est hétérogène par morceaux, on peut choisir de poursuivre sur la même base algorithmique que celle que nous avons décrite jusqu'ici, en regardant si le photon est absorbé dans la partie homogène courante, ou bien s'il atteint l'interface avec la partie homogène adjacente. S'il atteint l'interface, on poursuit le suivi du photon à partir de cette nouvelle position à travers la partie homogène suivante, etc. Cependant cette approche est souvent limitante,

- d'abord parce que tous les milieux ne sont pas homogènes par morceaux et que l'on est alors amené à introduire un maillage spatial, un découpage en morceaux suffisamment petits pour être supposés homogènes, introduisant ainsi une approximation qui est difficile à quantifier ;
- ensuite parce que lorsque les morceaux homogènes sont nombreux, leur traversée successive est numériquement coûteuse : le temps de calcul devient dépendant du maillage.

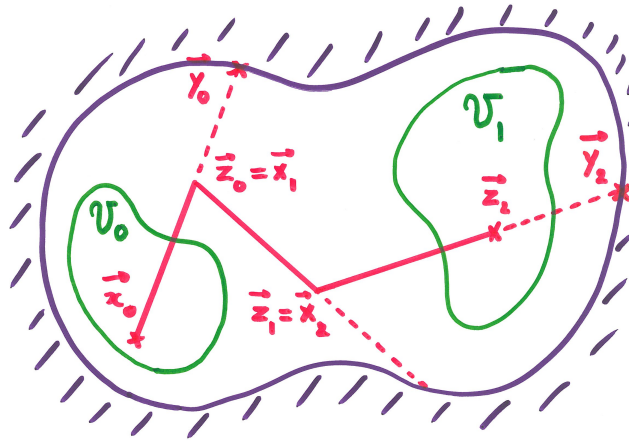
Il est alors possible d'introduire des collisions nulles (comme nous l'avons décrit dans la section 2.1.3) pour rendre le milieu homogène. Les collisions dans le milieu deviennent alors faciles à échantillonner. Par contre, quand une collision en volume est obtenue, il faut tester si cette collision est une absorption, une diffusion ou une collision nulle. Si c'est une absorption, l'algorithme s'arrête. Si c'est une diffusion, l'algorithme se poursuit avec le tirage aléatoire de la direction de diffusion. Si c'est une collision nulle, l'algorithme se poursuit comme si la collision n'avait pas eu lieu (le photon continue dans la même direction).

2.1.6 Synthèse de la littérature de cette première phase

Nous avons déjà mentionné le livre de Hammersley et Handscomb : "Monte Carlo Methods" [5]. Ce livre est un excellent moyen de rencontrer les fondements de la méthode de Monte Carlo telle qu'elle était pratiquée dans cette première phase de son histoire. Les premières éditions du livre de R. Siegel et J.R. Howell, "Thermal Radiation Heat Transfer" [6] sont également très fidèles à cette histoire et donnent de très nombreux détails pratiques. Nous donnons ici seulement quelques pistes de lecture.

Les algorithmes réciproques Reprenons l'exemple de l'échange entre deux surfaces de la section 2.1.1. L'algorithme part de la surface émettrice et on regarde si le photon atteint ou n'atteint pas la surface réceptrice. On comprend aisément que si la surface réceptrice est très petite ou très éloignée, la probabilité que le photon l'atteigne est très faible, ce qui se traduit par une forte variance de l'estimateur, donc une forte incertitude (ou le besoin d'un très grand nombre de réalisations pour atteindre une précision donnée). Les physiciens confrontés à cette difficulté ont bien sûr rapidement eu l'idée d'exploiter le principe de réciprocité pour justifier que les chemins de photons peuvent aussi être balayés en partant d'un point sur la surface réceptrice, dans une direction inverse, et en regardant si la surface émettrice a pu être responsable d'une émission de photons le long de cette trajectoire. Ces algorithmes réciproques sont tellement communs dans la littérature qu'il est parfois difficile d'identifier si une proposition algorithmique est directe ou réciproque. On peut en tout cas retenir que cette alternative fait partie des techniques les plus élémentaires de Monte Carlo en transfert radiatif.

Atténuation du poids Dans le même esprit, de nombreux auteurs ont identifié le fait que l'échantillonnage des positions d'absorption en volume n'avait comme objectif que de reproduire l'atténuation exponentielle liée à l'absorption le long d'un rayon. Il en est résulté de nombreux algorithmes où le poids du photon est atténué exponentiellement, les collisions en volume n'étant plus que des diffusions. L'algorithme ne s'arrête alors que lorsque le photon atteint une paroi. Un des mots-clés essentiels dans cette partie de la littérature est "roulette russe". On parle de roulette russe pour les algorithmes qui choisissent aléatoirement entre une absorption et une diffusion (les algorithmes analogues initiaux dont nous avons parlé). Lorsque le poids évalue continuellement le long du chemin, donc quand on abandonne la roulette russe, il faut qu'il reste une roulette russe quelque part pour arrêter l'algorithme. Donc soit on passe en continu sur l'absorption en volume (atténuation exponentielle du poids) et on conserve la roulette russe en surface, soit on utilise également une réduction du poids lors de chaque rencontre avec la paroi (on multiplie le poids par la réflectivité), mais alors plus rien n'arrête l'algorithme et on introduit un critère : non pas un critère d'arrêt quand le poids est suffisamment faible (le photon ne transporte presque plus rien) car alors l'algorithme serait biaisé (ne convergerait plus vers la solution exacte pour un nombre infini

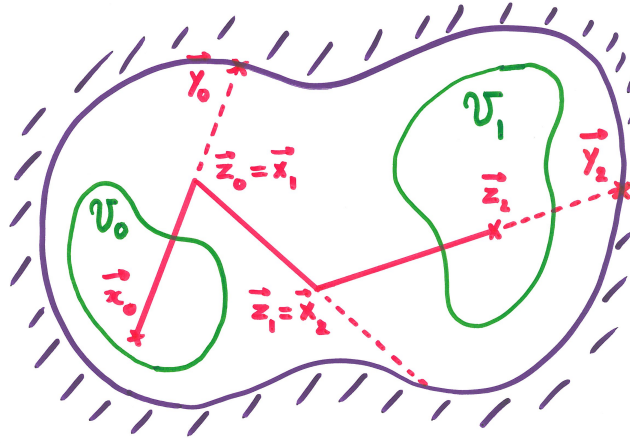


```

Echantillonnage de la position d'émission  $x_0$  uniformément dans  $\mathcal{V}_0$ ;
Echantillonnage de la direction d'émission  $\omega_0$  de façon isotrope;
Echantillonnage de la position de collision  $z_0$  selon la loi de Beer à partir de  $x_0$  dans la direction  $\omega_0$ ;
 $i = 0$ ;
start ;
if  $z_i$  est dans l'enceinte then
     $x_{i+1} = z_i$ ;
    Détermination du type de collision (test de Bernoulli);
    if Absorption then
        if  $x_{i+1}$  est dans  $\mathcal{V}_1$  then
             $w = 4\pi\kappa_{av}\mathcal{V}_0L_v^0(T_0)$ ;
        else
             $w = 0$ ;
        end
    else
        Echantillonnage de la direction  $\omega_{i+1}$  après diffusion;
        Echantillonnage de la position de collision  $z_{i+1}$  selon la loi de Beer à partir de  $x_{i+1}$  dans la direction  $\omega_{i+1}$ ;
         $i = i + 1$ ;
        go to start ;
    end
else
     $x_{i+1} = y_i$ ;
     $w = 0$ ;
end

```

FIGURE 6 – Algorithme de génération aléatoire du poids w pour l'exemple 6, à combiner avec l'algorithme 1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$. Formulation intégrale correspondante.



$$A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1) = \int_{\mathcal{V}_0} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{4\pi} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \int_{\mathcal{R}(\mathbf{x}_0, \omega_0)} p_{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0; \mathbf{x}_0, \omega_0) dz_0 \{ \mathcal{H}(\mathbf{x}_1 \in \mathcal{S}) \hat{w}(\mathbf{x}_1) + \mathcal{H}(\mathbf{x}_1 \in \mathcal{V}) \{ P_{abs} \hat{w}(\mathbf{x}_1) + (1 - P_{abs}) A_1 \} \} \quad (36)$$

$$A_i = \int_{4\pi} p_{\Omega_i}(\omega_i | \omega_{i-1}) d\omega_i \int_{\mathcal{R}(\mathbf{x}_i, \omega_i)} p_{\mathbf{z}_i}(\mathbf{z}_i; \mathbf{x}_i, \omega_i) dz_i \{ \mathcal{H}(\mathbf{x}_{i+1} \in \mathcal{S}) \hat{w}_{i+1}(\mathbf{x}_{i+1}) + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{i+1} \in \mathcal{V}) \{ P_{abs} \hat{w}_{i+1}(\mathbf{x}_{i+1}) + (1 - P_{abs}) A_{i+1} \} \} \quad (37)$$

$$\hat{w}_i(\mathbf{x}_i) = \mathcal{H}(\mathbf{x}_i \in \mathcal{V}_1) 4\pi \kappa_{av} \mathcal{V}_0 L_v^0(T_0) \quad (38)$$

FIGURE 7 – Formulation intégrale correspondant à l’algorithme de génération aléatoire du poids w pour l’exemple 6, à combiner avec l’algorithme 1 pour obtenir une évaluation de $A = \phi_v(\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$.

de réalisations), mais un critère de réintroduction de la roulette russe. Quand le poids passe en dessous de ce critère, on retourne à l’algorithme initial, avec une absorption ponctuelle en volume ou en paroi. Là encore, il faut un minimum d’investissement pour apprendre à bien lire la littérature sur la roulette russe et ses critères de réintroduction dans les algorithmes continus. Les présentations algorithmiques sont souvent beaucoup trop sommaires.

Echantillonnage par importance Dans l’exemple 5 nous avons utilisé un algorithme qui n’échantillonnait pas les positions d’émission en accord avec la physique d’émission, mais qui ensuite corrigeait cette "erreur" d’échantillonnage en multipliant le poids par un rapport de probabilités : la probabilité d’échantillonnage de la physique du rayonnement divisée par la probabilité d’échantillonnage utilisée en pratique. La raison de l’utilisation d’un tel algorithme était l’incapacité d’échantillonner pratiquement les positions d’émission selon la physique radiative (l’hétérogénéité d’émission était quelconque au sein du volume émetteur). Mais cette technique, consistant à ne pas échantillonner une variable aléatoire selon sa loi initiale, et à corriger le poids de façon à rester exacte, est une technique très utilisée pour une tout autre raison : elle porte le nom d’*échantillonnage par importance*. Ce nom vient du fait qu’il y a deux regards possibles sur la distribution statistique d’une variable au sein d’un algorithme de Monte Carlo : la justification théorique (physique) de cette distribution et son impact sur la variance (l’incertitude) de l’estimateur. Si nous prenons l’exemple 1, l’échange entre deux volumes isothermes, et si nous nous intéressons à l’échantillonnage des positions d’émission dans le volume émetteur, alors la justification théorique est simple : l’émission est uniforme au sein du volume émetteur. Par contre, si le milieu est fortement absorbant, alors les photons émis à une position proche du volume récepteur auront une probabilité beaucoup plus forte d’atteindre le récepteur (une probabilité plus faible d’être absorbés avant d’atteindre le récepteur). Les positions d’émission n’ont pas du tout le même impact sur la grandeur que nous cherchons à estimer, i.e. l’échange entre les deux volumes. Donc si nous échantillonnons les positions d’émission de façon uniforme (en accord avec la physique d’émission), alors l’algorithme de Monte Carlo aura une très forte variance. On comprend bien qu’en termes de convergence (nombre d’échantillons nécessaires pour atteindre une précision donnée) on a intérêt à échantillonner plus souvent les positions d’émission situées plus près du récepteur et moins souvent celles, loin du récepteur, qui n’ont qu’une très faible probabilité d’atteindre le récepteur. On utilise alors la même technique que dans l’exemple 5 : on échantillonne la position d’émission selon une loi qui nous semble pertinente en termes de convergence et on modifie le poids de façon à rester exact. Ce sera l’estimation d’erreur qui nous dira si cet échantillonnage préférentiel a été réussi, mais en tout cas nous ne prenons aucun risque théorique : l’algorithme continue de converger vers exactement la même solution et l’estimation de l’incertitude est aussi fiable que dans l’algorithme initial. L’algorithme atteint seulement cette même solution plus rapidement (avec un nombre de réalisations plus faible) si l’échantillonnage préférentiel est réussi.

Générateurs de nombres aléatoires La mise en œuvre d'un algorithme de Monte Carlo est bien sûr très directement liée à la capacité à échantillonner des lois statistiques avec un ordinateur, qui par conception fonctionne de façon déterministe. Cette question a été très délicate pendant les premières décennies car les résultats produits par la méthode dépendaient souvent sensiblement des algorithmes de génération aléatoire utilisés. Cette question est très largement dépassée aujourd'hui avec des algorithmes de génération aléatoire de très bonne qualité accessibles simplement dans tous les environnements de développement dédiés au calcul scientifique. La première littérature est donc très nourrie sur cette question, mais les utilisateurs actuels peuvent assez largement la laisser de côté. On peut néanmoins retenir la pratique suivante : quand un algorithme converge avec un nombre raisonnable de réalisations, on ne s'occupe pas trop de la question du choix du générateur aléatoire, mais lorsqu'on se retrouve à devoir faire appel à un nombre très élevé de réalisations cela signifie que la statistique des poids de Monte Carlo est très délicate et que la qualité du générateur aléatoire peut commencer à impacter le résultat ; on emploie alors plusieurs générateurs aléatoires différents et on vérifie que le résultat n'est pas sensible à ce choix. Ces situations sont rares, mais le test est facile à réaliser car encore une fois, tous les environnements de développement disposent de tous les principaux algorithmes de génération aléatoire existants et passer de l'un à l'autre ne pose aucune difficulté.

2.2 Approche déterministe :

Tandis que les méthodes stochastiques qui viennent d'être introduites traduisent un regard éminemment physique du transfert radiatif (ce transfert étant décrit par l'émission d'un très grand nombre de photons auxquels arrivent différents évènements de collision caractérisés par des lois statistiques spécifiques), les méthodes déterministes sont d'inspiration beaucoup plus mathématique et numérique car leur objet d'étude est l'équation de transfert radiatif telle qu'exprimée en (1) (accompagnée bien sûr des conditions aux limites (3)) et leur objectif est la résolution de cette équation par des méthodes numériques appropriées. Le domaine spatial de calcul va donc être discrétisé par une opération de maillage ; quant au domaine directionnel (couvrant 4π stéradians), il sera également discrétisé selon des directions bien particulières dans la méthode dite "des ordonnées discrètes", ou bien la forme de la dépendance directionnelle du champ de luminance sera imposée dans la méthode dite "des harmoniques sphériques" (nous verrons tout cela dans les sections qui suivent). Dans les deux cas, le problème de l'intégration de l'équation de transfert radiatif (1) associée à ses conditions aux limites (3) se transformera en un problème de détermination des valeurs du champ de luminance aux nœuds du maillage spatial et du maillage directionnel dans le cas de la méthode des ordonnées discrètes. Les équations (1) et (3) étant linéaires du champ de luminance, il s'ensuit que leurs versions discrétisées constitueront un système linéaire du champ de luminance discrétisé.

Comme énoncé en introduction, l'équation de transfert radiatif comporte deux termes caractéristiques : d'une part le terme de transport $\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega)$ et d'autre part le terme d'intégration angulaire $\int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega') d\omega'$. Nous décrivons dans la suite les premières stratégies proposées pour évaluer numériquement ces deux termes.

2.2.1 Terme de transport : différences finies et volumes finis

Dans les tout premiers travaux de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif par des approches déterministes, le terme de transport est traité de manière assez classique, essentiellement par différences finies ou par volumes finis.

La méthode des différences finies est bien connue. Elle consiste à remplacer les dérivées partielles par des approximations issues de développements de Taylor. Ainsi, en 1D, les $(x_i)_{1 \leq i \leq I}$ réalisant une discrétisation spatiale d'un intervalle $[a, b]$ (i.e. $a = x_1 < x_2 < \dots < x_I = b$), et les $(f_i)_{1 \leq i \leq I}$ désignant les valeurs prises par une fonction f aux abscisses x_i , on démontre aisément les divers résultats suivants :

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} + O(x_{i+1} - x_i) \quad (39)$$

$$f'(x_i) = \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + O(x_i - x_{i-1}) \quad (40)$$

Les taux d'accroissement $\frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$ et $\frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$ sont donc des approximations de $f'(x_i)$ à l'ordre 1 en $(x_{i+1} - x_i)$ et $(x_i - x_{i-1})$ respectivement. On peut obtenir une approximation de $f'(x_i)$ à un ordre plus élevé en exploitant dans une même expression les valeurs de f en x_{i-1} , x_i et x_{i+1} :

$$f'(x_i) = \frac{(x_i - x_{i-1})^2 f_{i+1} + (x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) f_i - (x_{i+1} - x_i)^2 f_{i-1}}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} + O((x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})) \quad (41)$$

En particulier, si x_i est équidistant de x_{i+1} et de x_{i-1} , et en notant $\delta = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$, la relation (41) ci-dessus se simplifie grandement pour devenir :

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + O(\delta^2) \quad (42)$$

Dans un problème 3D de transfert radiatif, et dans un repère orthonormé cartésien $(Ox_1x_2x_3)$, le terme de transport $\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_v$ s'exprime de la manière suivante :

$$\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_v = \omega_1 \frac{\partial L_v}{\partial x_1} + \omega_2 \frac{\partial L_v}{\partial x_2} + \omega_3 \frac{\partial L_v}{\partial x_3} \quad (43)$$

L'application de la méthode des différences finies à ce terme consiste à remplacer les dérivées partielles de la luminance par leurs approximations (39), (40), (41) ou (42). Ainsi, le domaine de calcul étant discrétisé en abscisses $(x_{1i})_{1 \leq i \leq I}$, ordonnées $(x_{2j})_{1 \leq j \leq J}$ et cotes $(x_{3k})_{1 \leq k \leq K}$, on écrira :

$$(\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_v)_{i,j,k} = \omega_1 \left(\frac{\partial L_v}{\partial x_1} \right)_{i,j,k} + \omega_2 \left(\frac{\partial L_v}{\partial x_2} \right)_{i,j,k} + \omega_3 \left(\frac{\partial L_v}{\partial x_3} \right)_{i,j,k} \quad (44)$$

Puis, dans cette équation, on remplacera $\left(\frac{\partial L_v}{\partial x_1} \right)_{i,j,k}$ par $\frac{L_{v\ i+1,j,k} - L_{v\ i,j,k}}{x_{1\ i+1} - x_{1\ i}}$, $\frac{L_{v\ i,j,k} - L_{v\ i-1,j,k}}{x_{1\ i} - x_{1\ i-1}}$ ou $\frac{L_{v\ i+1,j,k} - L_{v\ i-1,j,k}}{x_{1\ i+1} - x_{1\ i-1}}$ (cette dernière expression n'étant valable que si $x_{1\ i+1} - x_{1\ i} = x_{1\ i} - x_{1\ i-1}$). On fera bien sûr de même avec les deux autres dérivées partielles $\left(\frac{\partial L_v}{\partial x_2} \right)_{i,j,k}$ et $\left(\frac{\partial L_v}{\partial x_3} \right)_{i,j,k}$.

Le principal avantage de la méthode des différences finies est sa grande simplicité de mise en œuvre. En revanche, elle souffre de deux limitations importantes. La première réside dans le fait que le domaine de calcul doit pouvoir être discrétisé de manière dite structurée : chaque nœud de la discrétisation doit résulter des discrétisations des trois axes de coordonnées réalisées de manière indépendante les unes des autres. Ceci limite grandement le champ des géométries sur lesquelles la méthode est applicable : parallélépipède rectangle en coordonnées cartésiennes, cylindre (plein ou creux) ou portion de ce cylindre en coordonnées cylindriques, boule (pleine ou creuse) ou portion de cette boule en coordonnées sphériques. La deuxième a trait au principe de conservation de l'énergie radiative, principe vérifié par l'équation de transfert radiatif (1) puisque cette équation est bâtie dessus. En revanche, le remplacement des dérivées partielles par leurs expressions par différences finies ne garantit pas le maintien du principe de conservation de l'énergie radiative dans l'équation de transfert radiatif discrétisé.

Pour pallier ces deux limitations, la méthode des volumes finis a également été proposée pour résoudre numériquement l'équation de transfert radiatif. Dans un premier temps, le domaine de calcul est discrétisé, de manière structurée ou non, puis à chaque nœud N de la discrétisation est associé un volume de contrôle appelé également volume fini et que nous noterons $VF(N)$. Ensuite, l'équation de transfert radiatif (1) est intégrée sur $VF(N)$, ce qui donne :

$$\begin{aligned} \omega \cdot \int_{VF(N)} \mathbf{grad}_x L_v(\mathbf{x}, \omega) d\mathbf{x} &= -\kappa_{ev} \int_{VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) d\mathbf{x} \\ &+ \kappa_{av} \int_{VF(N)} L_v^0(T(\mathbf{x})) d\mathbf{x} + \kappa_{dv} \int_{4\pi} \left(\int_{VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega') d\mathbf{x} \right) p_{\Omega, v}^d(\omega|\omega') d\omega' \end{aligned} \quad (45)$$

À ce stade, le principe de conservation de l'énergie radiative est maintenu ; la méthode des volumes finis est donc qualifiée de conservative. Le théorème de Green-Ostrogradski permet de réexprimer la première intégrale de volume dans (45) sous la forme suivante :

$$\int_{VF(N)} \mathbf{grad}_x L_v(\mathbf{x}, \omega) d\mathbf{x} = \int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} \quad (46)$$

où $\partial VF(N)$ désigne la frontière du volume fini $VF(N)$ et \mathbf{n}_{ext} le vecteur unitaire normal à $\partial VF(N)$ et orienté vers l'extérieur de $VF(N)$. Par ailleurs, pour ce qui est des trois intégrales de volume restantes dans (45), une simplification courante consiste à considérer que la luminance et la température sont uniformes dans $VF(N)$, de sorte que, par exemple, le terme $\int_{VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) d\mathbf{x}$ peut être remplacé par $L_v(\mathbf{x}_N, \omega) V_N$ où \mathbf{x}_N désigne le vecteur position de N et V_N le volume de $VF(N)$. Finalement, l'équation de transfert radiatif dans sa version volumes finis s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \omega \cdot \int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} &= -\kappa_{ev} L_v(\mathbf{x}_N, \omega) V_N \\ &+ \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x}_N)) V_N + \kappa_{dv} V_N \int_{4\pi} L_v(\mathbf{x}_N, \omega') p_{\Omega, v}^d(\omega|\omega') d\omega' \end{aligned} \quad (47)$$

La dernière étape consiste à exprimer l'intégrale de frontière $\int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x}$. Pour cela, dans le cas général, i.e. lorsque le maillage est non structuré, on procède comme dans le cadre de la méthode des éléments finis : on introduit une base de fonctions de forme $\phi_P(\mathbf{x})$ associées à tous les nœuds P du maillage, puis on postule que les dépendances spatiales de la luminance et de la température peuvent s'écrire sous la forme de combinaisons linéaires de ces fonctions de forme :

$$L_v(\mathbf{x}, \omega) = \sum_P L_{vP}(\omega) \phi_P(\mathbf{x}) \quad (48)$$

$$T(\mathbf{x}) = \sum_P T_P \phi_P(\mathbf{x}) \quad (49)$$

Dans ces expressions, le champ de température étant supposé connu, les T_P le sont également ; en revanche, notre inconnue étant le champ de luminance, les coefficients $L_{vP}(\omega)$ de la combinaison linéaire, qui a priori dépendent de la fréquence et de la direction, sont les inconnues du problème. Avec la nouvelle écriture (48) du champ de luminance, l'intégrale de frontière devient :

$$\int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} = \sum_P L_{vP}(\omega) \int_{\partial VF(N)} \phi_P(\mathbf{x}) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} \quad (50)$$

De plus, les fonctions de forme $\phi_P(\mathbf{x})$ sont souvent choisies de telle sorte que $\phi_P(\mathbf{x}) = 0$ si \mathbf{x} n'appartient à aucun élément du maillage contenant le nœud P . Sous cette hypothèse, la sommation discrète à droite du signe égal dans (50), a priori concernant tous les nœuds du maillage, se limite en réalité au nœud N ainsi qu'aux nœuds partageant un élément avec N . De cette manière, on aboutit à une expression de l'intégrale de frontière ne faisant intervenir que N et ses nœuds voisins, et ce de manière linéaire.

À titre d'illustration, en géométrie 2D, considérons un maillage du domaine de calcul en éléments triangulaires, et considérons un nœud N intérieur au maillage, qui est donc entièrement cerné de tels éléments. Un de ceux-ci, de sommets N , A et B (où A et B sont également des nœuds du maillage) et noté $t(N, A, B)$, est représenté à la figure 8 (figure de gauche). On introduit les points a , b et c , centres des segments $[NA]$, $[NB]$ et $[AB]$ respectivement ; les segments $[Ab]$, $[Ba]$ et $[Nc]$, médianes du triangle, se coupent en un même point g , isobarycentre du triangle, et fractionnent celui-ci en six sous-triangles de surfaces toutes identiques. On choisit alors d'attribuer au volume fini de N $VF(N)$ les deux sous-triangles ayant N pour sommet, i.e. les triangles $t(N, a, g)$ et $t(N, g, b)$ (les quatre sous-triangles restants, i.e. $t(A, c, g)$, $t(A, g, a)$, $t(B, b, g)$ et $t(B, g, c)$, étant attribués aux volumes finis $VF(A)$ pour les deux premiers et $VF(B)$ pour les deux derniers). Répétant cette procédure pour tous les éléments cernant N , on obtient la totalité du volume fini $VF(N)$ tel qu'illustré à la figure 8 (figure de droite). Quant aux fonctions de forme $\phi_P(\mathbf{x})$, on choisit de les définir par les trois propriétés suivantes : la fonction ϕ_P vaut 1 à son nœud P , elle vaut 0 à tous les autres nœuds, et elle est affine sur chaque élément triangulaire du maillage. Ainsi définie, la fonction ϕ_P est non nulle uniquement sur les éléments contenant le nœud P ; et sur chacun de ces éléments, elle est égale à la coordonnée barycentrique par rapport au sommet P . Dès lors, ayant arrêté les définitions du volume fini $VF(N)$ et des fonctions de forme $\phi_P(\mathbf{x})$, on peut exprimer l'intégrale de frontière $\int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x}$; et on démontre qu'elle vaut :

$$\int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} = \frac{1}{12} \sum_{t(N, A, B)} \left(L_{vN}(\omega) \left(5l(a, g) \mathbf{n}_{\text{ext}}^{ag} + 5l(g, b) \mathbf{n}_{\text{ext}}^{gb} \right) + L_{vA}(\omega) \left(5l(a, g) \mathbf{n}_{\text{ext}}^{ag} + 2l(g, b) \mathbf{n}_{\text{ext}}^{gb} \right) + L_{vB}(\omega) \left(2l(a, g) \mathbf{n}_{\text{ext}}^{ag} + 5l(g, b) \mathbf{n}_{\text{ext}}^{gb} \right) \right) \quad (51)$$

expression dans laquelle :

- La sommation porte sur tous les éléments $t(N, A, B)$ ayant N parmi leurs trois sommets.
- La notation $l(i, j)$ désigne la longueur du segment $[ij]$.
- Le vecteur $\mathbf{n}_{\text{ext}}^{ij}$ est le vecteur unitaire normal au segment $[ij]$ et orienté vers l'extérieur de $VF(N)$.

Cette expression (51) de l'intégrale de frontière ne fait bien intervenir les coefficients $L_{vP}(\omega)$ qu'au nœud N et à ses nœuds voisins.

Dans le cas beaucoup plus simple, en géométrie 3D cartésienne, d'un maillage structuré et régulier dans chacune des trois directions, on introduit les notations portées sur la figure 9 :

- N est le nœud du maillage où on écrit la formulation volumes finis de l'ETR.
- A et B sont les nœuds voisins de N selon l'axe x_1 : $\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_N + \delta x_1 \mathbf{e}_1$ et $\mathbf{x}_B = \mathbf{x}_N - \delta x_1 \mathbf{e}_1$ où δx_1 est le pas du maillage dans la direction x_1 et \mathbf{e}_1 le vecteur unitaire portant l'axe x_1 . De même, C et D sont les nœuds voisins de N selon l'axe x_2 : $\mathbf{x}_C = \mathbf{x}_N + \delta x_2 \mathbf{e}_2$ et $\mathbf{x}_D = \mathbf{x}_N - \delta x_2 \mathbf{e}_2$; et E et F sont les nœuds voisins de N selon l'axe x_3 : $\mathbf{x}_E = \mathbf{x}_N + \delta x_3 \mathbf{e}_3$ et $\mathbf{x}_F = \mathbf{x}_N - \delta x_3 \mathbf{e}_3$.
- a est le milieu du segment $[NA]$; de même, b , c , d , e et f sont les milieux de $[NB]$, $[NC]$, $[ND]$, $[NE]$ et $[NF]$.

Dans cette configuration, le volume fini $VF(N)$ s'impose naturellement : il s'agit du parallélépipède rectangle centré en N et passant par les points a , b , c , d , e et f . L'intégrale de frontière a alors pour expression :

$$\int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} = L_v(\mathbf{x}_a, \omega) \mathbf{e}_1 \delta x_2 \delta x_3 - L_v(\mathbf{x}_b, \omega) \mathbf{e}_1 \delta x_2 \delta x_3 + L_v(\mathbf{x}_c, \omega) \mathbf{e}_2 \delta x_1 \delta x_3 - L_v(\mathbf{x}_d, \omega) \mathbf{e}_2 \delta x_1 \delta x_3 + L_v(\mathbf{x}_e, \omega) \mathbf{e}_3 \delta x_1 \delta x_2 - L_v(\mathbf{x}_f, \omega) \mathbf{e}_3 \delta x_1 \delta x_2 = (L_v(\mathbf{x}_a, \omega) - L_v(\mathbf{x}_b, \omega)) \delta x_2 \delta x_3 \mathbf{e}_1 + (L_v(\mathbf{x}_c, \omega) - L_v(\mathbf{x}_d, \omega)) \delta x_1 \delta x_3 \mathbf{e}_2 + (L_v(\mathbf{x}_e, \omega) - L_v(\mathbf{x}_f, \omega)) \delta x_1 \delta x_2 \mathbf{e}_3 \quad (52)$$

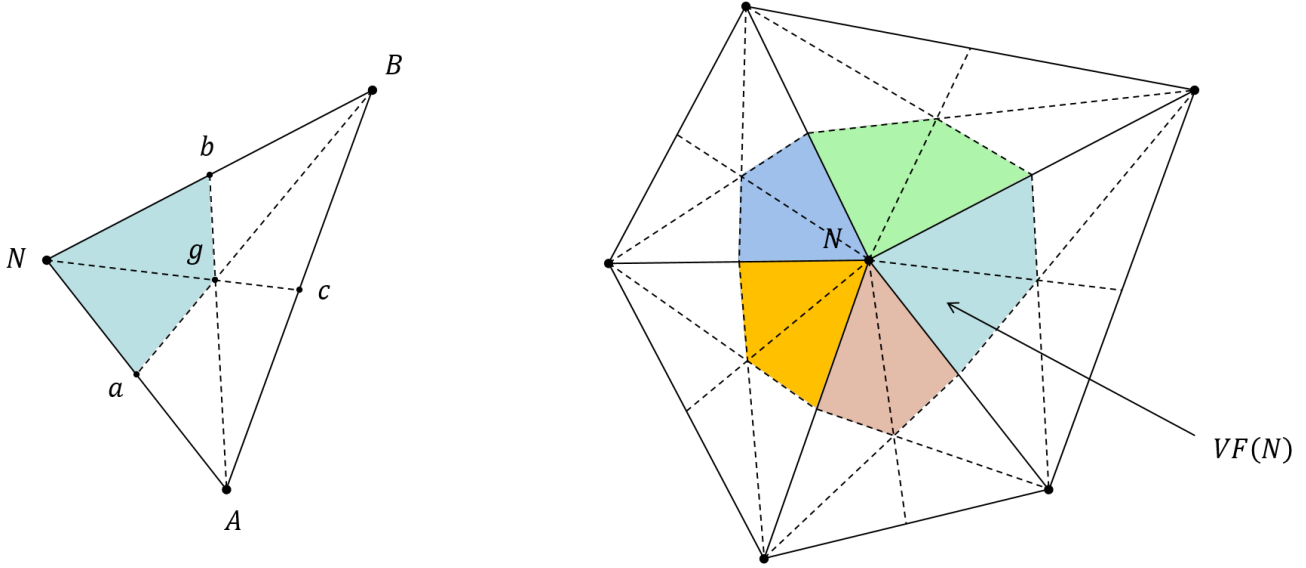


FIGURE 8 – Figure de gauche : nœuds (en lettres majuscules) et points (en lettres minuscules); la zone colorée correspond à la contribution de l'élément triangulaire $t(N, A, B)$ au volume fini de N $VF(N)$. Figure de droite : illustration du volume fini $VF(N)$, réunion de toutes les zones colorées; chaque zone colorée correspond à la contribution d'un élément triangulaire de sommet N .

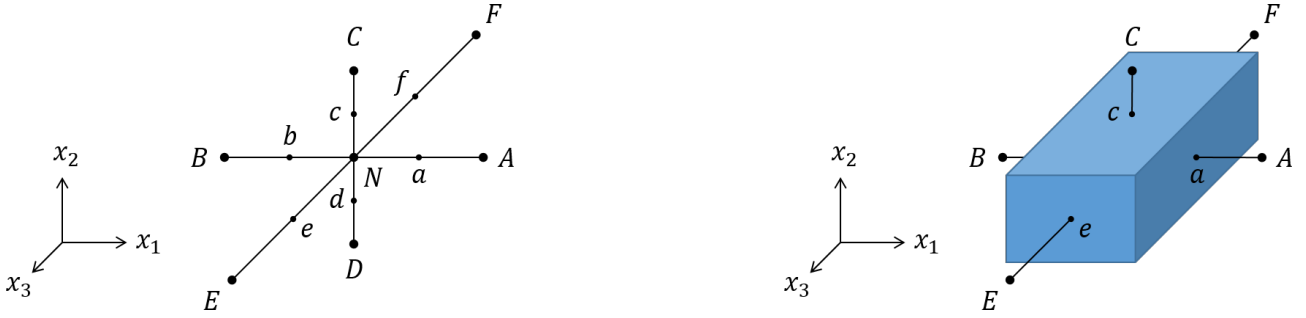


FIGURE 9 – Figure de gauche : nœuds (en lettres majuscules) et points (en lettres minuscules). Figure de droite : illustration du volume fini $VF(N)$.

Ensuite, a étant le milieu de $[NA]$, on exprime $L_v(\mathbf{x}_a, \omega)$ par la relation $\frac{L_v(\mathbf{x}_N, \omega) + L_v(\mathbf{x}_A, \omega)}{2}$. Puis, après avoir fait de même avec les cinq autres termes apparaissant dans (52), on aboutit à :

$$\begin{aligned} \int_{\partial VF(N)} L_v(\mathbf{x}, \omega) \mathbf{n}_{\text{ext}} d\mathbf{x} &= \frac{L_v(\mathbf{x}_A, \omega) - L_v(\mathbf{x}_B, \omega)}{2} \delta x_2 \delta x_3 \mathbf{e}_1 + \frac{L_v(\mathbf{x}_C, \omega) - L_v(\mathbf{x}_D, \omega)}{2} \delta x_1 \delta x_3 \mathbf{e}_2 \\ &+ \frac{L_v(\mathbf{x}_E, \omega) - L_v(\mathbf{x}_F, \omega)}{2} \delta x_1 \delta x_2 \mathbf{e}_3 = \frac{L_v(\mathbf{x}_A, \omega) - L_v(\mathbf{x}_B, \omega)}{2\delta x_1} V_N \mathbf{e}_1 \\ &+ \frac{L_v(\mathbf{x}_C, \omega) - L_v(\mathbf{x}_D, \omega)}{2\delta x_2} V_N \mathbf{e}_2 + \frac{L_v(\mathbf{x}_E, \omega) - L_v(\mathbf{x}_F, \omega)}{2\delta x_3} V_N \mathbf{e}_3 \end{aligned} \quad (53)$$

car V_N , volume de $VF(N)$, vaut $\delta x_1 \delta x_2 \delta x_3$. Finalement, l'injection de l'expression (53) dans l'équation de transfert radiatif (47) donne :

$$\begin{aligned} \omega \cdot \left(\frac{L_v(\mathbf{x}_A, \omega) - L_v(\mathbf{x}_B, \omega)}{2\delta x_1} \mathbf{e}_1 + \frac{L_v(\mathbf{x}_C, \omega) - L_v(\mathbf{x}_D, \omega)}{2\delta x_2} \mathbf{e}_2 + \frac{L_v(\mathbf{x}_E, \omega) - L_v(\mathbf{x}_F, \omega)}{2\delta x_3} \mathbf{e}_3 \right) \\ = -\kappa_{ev} L_v(\mathbf{x}_N, \omega) + \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x}_N)) + \kappa_{dv} \int_{4\pi} L_v(\mathbf{x}_N, \omega') p_{\Omega, v}^d(\omega|\omega') d\omega' \end{aligned} \quad (54)$$

et il s'avère que, dans le cas particulier traité ici (géométrie 3D cartésienne et maillage structuré et régulier dans chacune des trois directions), la formulation volumes finis (54) correspond exactement à celle qu'on aurait obtenue par différences finies. En effet, le terme entre les grandes parenthèses à gauche du signe égal dans (54) n'est rien d'autre que l'expression, via l'approche différences finies, du gradient en géométrie 3D cartésienne et pour des discrétisations régulières. Cela dit, ne perdons pas de vue les deux grands avantages de la méthode des volumes finis par rapport à celle des différences finies : d'une part sa capacité à s'appliquer à n'importe quel type de géométrie, et d'autre part sa nature conservative.

2.2.2 Terme d'intégration angulaire : méthode des harmoniques sphériques

Dès les premiers travaux de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif, les méthodes des ordonnées discrètes d'une part et des harmoniques sphériques d'autre part ont été proposées pour traiter la dépendance directionnelle du champ de luminance. Les activités autour de la méthode des ordonnées discrètes ayant été particulièrement fécondes à partir des années 1970, lorsque la puissance de calcul a commencé à croître significativement, nous décrivons cette méthode dans la section 3.2.

La méthode des harmoniques sphériques a été inspirée des considérations et résultats mathématiques suivants. Lorsque l'on a affaire à des fonctions dépendant d'une variable directionnelle, autrement dit d'un vecteur ω unitaire, il peut apparaître opportun de faire appel aux deux angles des coordonnées sphériques θ et ϕ pour repérer cette direction ω , puis ensuite d'introduire les fonctions dites "harmoniques sphériques" suivantes :

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\phi) \quad (55)$$

Dans cette expression, l est un entier positif ou nul, m est un entier relatif compris entre $(-l)$ et l , et les fonctions $P_l^m(\cos \theta)$ (avec $0 \leq m \leq l$), appelées "polynômes associés de Legendre", ont pour expressions :

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l-m}((x^2-1)^l)}{dx^{l-m}} \quad (56)$$

Attention : la qualification de "polynômes" pour ces fonctions $P_l^m(x)$ est un peu abusive. En effet, ce n'en sont pas lorsque m est impair.

Les fonctions $Y_l^m(\theta, \phi)$ exprimées en (55) sont les fonctions propres de l'opérateur laplacien sur la sphère unité, avec $(-l)(l+1)$ pour valeurs propres associées. Elles constituent un ensemble de fonctions orthogonales deux à deux au sens du produit scalaire hermitien suivant :

$$\langle F(\theta, \phi) | G(\theta, \phi) \rangle = \int_{4\pi} F(\theta, \phi) \overline{G(\theta, \phi)} d\omega = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} F(\theta, \phi) \overline{G(\theta, \phi)} \sin \theta d\theta d\phi \quad (57)$$

où la notation \overline{G} signifie le complexe conjugué de G . Autrement dit :

$$\langle Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) | Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) \rangle = 0 \quad \text{si} \quad (l_1, m_1) \neq (l_2, m_2) \quad (58)$$

Par ailleurs, le choix de la constante multiplicative devant $P_l^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\phi)$ dans l'expression (55) se justifie par le fait que les fonctions $Y_l^m(\theta, \phi)$ ainsi définies sont normalisées, i.e. elles vérifient $\langle Y_l^m(\theta, \phi) | Y_l^m(\theta, \phi) \rangle = 1$. Finalement, l'ensemble de toutes les fonctions $Y_l^m(\theta, \phi)$ (avec l entier positif ou nul et m entier relatif compris entre $(-l)$ et l) peut être considéré comme constituant une base orthonormée de l'espace des fonctions de θ et de ϕ , car un résultat mathématique affirme que toute fonction $F(\theta, \phi)$ suffisamment régulière peut s'écrire sous la forme d'un développement en série des fonctions harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \phi)$:

$$F(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l A_l^m Y_l^m(\theta, \phi) \quad (59)$$

Les expressions des coefficients A_l^m de ce développement découlent directement des propriétés d'orthonormalité de la base des $Y_l^m(\theta, \phi)$:

$$A_l^m = \langle F(\theta, \phi) | Y_l^m(\theta, \phi) \rangle = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} F(\theta, \phi) \overline{Y_l^m(\theta, \phi)} \sin \theta d\theta d\phi \quad (60)$$

La possibilité d'exprimer toute fonction de la direction $F(\omega)$ sous la forme d'un développement en série des fonctions $Y_l^m(\theta, \phi)$ est à la base de la méthode des harmoniques sphériques. En effet, cette méthode, initialement proposée par J.H. Jeans [7], consiste à exprimer le champ de luminance $L_\nu(\mathbf{x}, \omega)$ sous la forme suivante :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l A_{\nu l}^m(\mathbf{x}) Y_l^m(\omega) \quad (61)$$

dans laquelle les coefficients $A_{\nu l}^m$ du développement portent la dépendance vis-à-vis de la position \mathbf{x} (et aussi de la fréquence ν). Avec cette nouvelle écriture, les inconnues sont à présent les fonctions $A_{\nu l}^m(\mathbf{x})$, en nombre infini ; d'où l'idée de tronquer la série infinie (61) aux entiers l compris entre 0 et une valeur maximale N , ce qui réduit la série infinie à une somme de

$(N + 1)^2$ termes. La méthode est alors qualifiée de "méthode P_N ". Dans ce qui suit, nous allons décrire les grandes lignes de la mise en œuvre de la méthode P_1 ; puis nous évoquerons rapidement le passage aux niveaux supérieurs.

Lorsque $N = 1$, le développement en série (61) compte quatre termes :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = A_{\nu 0}^0(\mathbf{x})Y_0^0(\boldsymbol{\omega}) + A_{\nu 1}^{-1}(\mathbf{x})Y_1^{-1}(\boldsymbol{\omega}) + A_{\nu 1}^0(\mathbf{x})Y_1^0(\boldsymbol{\omega}) + A_{\nu 1}^1(\mathbf{x})Y_1^1(\boldsymbol{\omega}) \quad (62)$$

Les quatre harmoniques sphériques y apparaissant ont pour expressions :

$$\begin{aligned} Y_0^0(\boldsymbol{\omega}) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & - & & Y_1^{-1}(\boldsymbol{\omega}) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(-i\phi) \\ Y_1^0(\boldsymbol{\omega}) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta & - & & Y_1^1(\boldsymbol{\omega}) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(i\phi) \end{aligned} \quad (63)$$

et les inconnues sont les quatre coefficients $A_{\nu 0}^0(\mathbf{x})$, $A_{\nu 1}^{-1}(\mathbf{x})$, $A_{\nu 1}^0(\mathbf{x})$ et $A_{\nu 1}^1(\mathbf{x})$. A ce stade, on introduit la notion de moments directionnels de la luminance, définis comme étant les intégrales sur 4π stéradians de la luminance multipliée par des produits de puissances des composantes du vecteur direction $\boldsymbol{\omega}$. Ainsi, le moment d'ordre 0 $L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})$ a pour expression :

$$L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \quad (64)$$

De même, les trois moments d'ordre 1 sont :

$$L_\nu^{(i)}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} \omega_i L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \quad \text{avec} \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (65)$$

où $\omega_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\omega_2 = \sin \theta \sin \phi$ et $\omega_3 = \cos \theta$; et on peut généraliser cette définition aux ordres supérieurs :

$$L_\nu^{(ijkl\dots)}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} \omega_i \omega_j \omega_k \omega_l \dots L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \quad \text{avec} \quad i, j, k, l, \dots \in \{1, 2, 3\} \quad (66)$$

Le moment d'ordre 0 représente la densité volumique et spectrale d'énergie radiative (au facteur multiplicatif v_g près où v_g désigne la vitesse de groupe); les trois moments d'ordre 1 sont les trois composantes du vecteur flux surfacique radiatif monochromatique; et les neuf moments d'ordre 2 sont les neuf composantes du tenseur (symétrique) des contraintes et pressions radiatives monochromatiques (encore une fois au facteur multiplicatif v_g près). Les moments d'ordre > 2 n'ont pas de sens physique.

Injectant l'expression (62) de la luminance dans les expressions (64) et (65) des moments d'ordres 0 et 1, puis effectuant le calcul des intégrales angulaires apparaissant dans ces expressions, on aboutit aux expressions suivantes des quatre moments :

$$\begin{aligned} L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) &= \sqrt{4\pi} A_{\nu 0}^0(\mathbf{x}) & - & & L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left(A_{\nu 1}^1(\mathbf{x}) + A_{\nu 1}^{-1}(\mathbf{x}) \right) \\ L_\nu^{(2)}(\mathbf{x}) &= i\sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left(A_{\nu 1}^1(\mathbf{x}) - A_{\nu 1}^{-1}(\mathbf{x}) \right) & - & & L_\nu^{(3)}(\mathbf{x}) &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} A_{\nu 1}^0(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (67)$$

Ces quatre égalités permettent d'exprimer les coefficients $A_{\nu l}^m(\mathbf{x})$ ($0 \leq l \leq 1$, $-l \leq m \leq l$) en fonction des moments d'ordres 0 et 1 :

$$\begin{aligned} A_{\nu 0}^0(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) & - & & A_{\nu 1}^{-1}(\mathbf{x}) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) + iL_\nu^{(2)}(\mathbf{x}) \right) \\ A_{\nu 1}^0(\mathbf{x}) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} L_\nu^{(3)}(\mathbf{x}) & - & & A_{\nu 1}^1(\mathbf{x}) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) - iL_\nu^{(2)}(\mathbf{x}) \right) \end{aligned} \quad (68)$$

Puis, injectant les expressions des coefficients (formules (68)) ainsi que celles des harmoniques sphériques (formules (63)) dans l'expression (62) de la luminance, on aboutit finalement à une nouvelle formulation de celle-ci :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{4\pi} \left(L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) + 3 \left(L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) \sin \theta \cos \phi + L_\nu^{(2)}(\mathbf{x}) \sin \theta \sin \phi + L_\nu^{(3)}(\mathbf{x}) \cos \theta \right) \right) \quad (69)$$

dans laquelle les coefficients ont été remplacés par les moments. Dès lors, nos inconnues sont à présent ces quatre moments, et il s'agit de préciser les équations qui les régissent. La première s'obtient en repartant de l'équation de transfert radiatif (1), que l'on intègre sur 4π stéradians, ce qui donne :

$$\int_{4\pi} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} = -\kappa_{e\nu} \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} + \kappa_{a\nu} L_\nu^0(T(\mathbf{x})) \int_{4\pi} d\boldsymbol{\omega} \\ + \kappa_{d\nu} \int_{\omega=4\pi} \int_{\omega'=4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' d\boldsymbol{\omega} \quad (70)$$

La première intégrale peut être transformée ainsi :

$$\int_{4\pi} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} = \int_{4\pi} \text{div} (L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} = \int_{4\pi} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\omega_i L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})) \right) d\boldsymbol{\omega} \\ = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\int_{4\pi} \omega_i L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \right) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial L_\nu^{(i)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} \quad (71)$$

Les deuxième et troisième intégrales dans (70) deviennent respectivement $L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})$ et $4\pi\kappa_{a\nu}L_\nu^0(T(\mathbf{x}))$. Quant à la dernière, elle se simplifie grandement du fait de la condition de normalisation de la fonction de phase (2) :

$$\int_{\omega=4\pi} \int_{\omega'=4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' d\boldsymbol{\omega} = \int_{\omega'=4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') \left(\int_{\omega=4\pi} p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega} \right) d\boldsymbol{\omega}' \\ = \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' = L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) \quad (72)$$

Ainsi l'équation (70) devient :

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial L_\nu^{(i)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} + \kappa_{a\nu} L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) = 4\pi\kappa_{a\nu} L_\nu^0(T(\mathbf{x})) \quad (73)$$

et permet d'exprimer le moment d'ordre 0 en fonction des trois moments d'ordre 1. Il faut donc à présent écrire d'autres équations qui vont permettre d'exprimer ces trois moments d'ordre 1. Celle régissant $L_\nu^{(1)}(\mathbf{x})$ s'obtient en multipliant l'équation de transfert radiatif par ω_1 puis en procédant à une intégration angulaire sur 4π stéradians :

$$\int_{4\pi} \omega_1 (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})) d\boldsymbol{\omega} = -\kappa_{e\nu} \int_{4\pi} \omega_1 L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} + \kappa_{a\nu} L_\nu^0(T(\mathbf{x})) \int_{4\pi} \omega_1 d\boldsymbol{\omega} \\ + \kappa_{d\nu} \int_{\omega=4\pi} \int_{\omega'=4\pi} \omega_1 L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' d\boldsymbol{\omega} \quad (74)$$

La première intégrale se transforme ainsi :

$$\int_{4\pi} \omega_1 (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})) d\boldsymbol{\omega} = \int_{4\pi} \text{div} (\omega_1 L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} = \int_{4\pi} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\omega_1 \omega_i L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})) \right) d\boldsymbol{\omega} \\ = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\int_{4\pi} \omega_1 \omega_i L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \right) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial L_\nu^{(1i)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} \quad (75)$$

où $L_\nu^{(11)}(\mathbf{x})$, $L_\nu^{(12)}(\mathbf{x})$ et $L_\nu^{(13)}(\mathbf{x})$ sont les moments d'ordre 2. La deuxième intégrale dans (74) devient $L_\nu^{(1)}(\mathbf{x})$, et la troisième est nulle car $\int_{4\pi} \boldsymbol{\omega} d\boldsymbol{\omega} = \mathbf{0}$. Quant à la dernière, elle peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\int_{\omega=4\pi} \int_{\omega'=4\pi} \omega_1 L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' d\boldsymbol{\omega} = \int_{\omega'=4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') \left(\int_{\omega=4\pi} \omega_1 p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega} \right) d\boldsymbol{\omega}' \quad (76)$$

Lorsque la fonction de phase $p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}')$ ne dépend que de l'angle Θ entre $\boldsymbol{\omega}'$ et $\boldsymbol{\omega}$ (cet angle Θ étant appelé l'angle de diffusion), on démontre le résultat mathématique suivant :

$$\int_{4\pi} p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') \boldsymbol{\omega} d\boldsymbol{\omega} = g_\nu \boldsymbol{\omega}' \quad \text{avec} \quad g_\nu = \int_{4\pi} \cos \Theta p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega} \quad (77)$$

(le scalaire g_ν s'appelle le facteur d'asymétrie monochromatique de la fonction de phase). Par conséquent, moyennant cette hypothèse supplémentaire ($p_{\Omega,\nu}^d(\omega|\omega')$ dépendant uniquement de Θ), la dernière intégrale dans (74) devient, en repartant de l'égalité (76) :

$$\int_{\omega'=4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') \left(\int_{\omega=4\pi} \omega_1 p_{\Omega,\nu}^d(\omega|\omega') d\omega \right) d\omega' = \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') g_\nu \omega_1' d\omega' = g_\nu L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) \quad (78)$$

de sorte que l'équation (74) se réécrit sous la forme finale suivante :

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial L_\nu^{(1i)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} + (\kappa_{e\nu} - g_\nu \kappa_{d\nu}) L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) = 0 \quad (79)$$

En procédant de manière tout-à-fait analogue, on obtient les équations suivantes régissant les deux autres moments d'ordre 1 $L_\nu^{(2)}(\mathbf{x})$ et $L_\nu^{(3)}(\mathbf{x})$:

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial L_\nu^{(2i)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} + (\kappa_{e\nu} - g_\nu \kappa_{d\nu}) L_\nu^{(2)}(\mathbf{x}) = 0 \quad (80)$$

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial L_\nu^{(3i)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} + (\kappa_{e\nu} - g_\nu \kappa_{d\nu}) L_\nu^{(3)}(\mathbf{x}) = 0 \quad (81)$$

Il apparaît ainsi que l'équation (73) régissant le moment d'ordre 0 fait intervenir les moments d'ordre 1, et que les équations (79) à (81) régissant les moments d'ordre 1 font intervenir le tenseur des moments d'ordre 2. Afin de permettre la résolution du problème mathématique, on doit donc ajouter une relation de fermeture portant sur le tenseur des moments d'ordre 2. Cette relation s'obtient en calculant directement ces moments sur la base de l'expression (69) du champ de luminance. Ainsi, le premier moment $L_\nu^{(11)}(\mathbf{x})$ a pour expression :

$$\begin{aligned} L_\nu^{(11)}(\mathbf{x}) &= \int_{4\pi} \omega_1^2 L_\nu(\mathbf{x}, \omega) d\omega \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \phi \left(L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) + 3 \left(L_\nu^{(1)}(\mathbf{x}) \sin \theta \cos \phi + L_\nu^{(2)}(\mathbf{x}) \sin \theta \sin \phi + L_\nu^{(3)}(\mathbf{x}) \cos \theta \right) \right) d\omega \quad (82) \end{aligned}$$

et le calcul donne $L_\nu^{(11)}(\mathbf{x}) = \frac{L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})}{3}$. En procédant de même avec les autres moments, on aboutit à la relation de fermeture suivante :

$$L_\nu^{(ij)}(\mathbf{x}) = \delta_{i,j} \frac{L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})}{3} \quad \text{avec} \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (83)$$

où $\delta_{i,j}$ désigne le symbole de Kronecker. Cette relation simplifie grandement les équations (79), (80) et (81), qui deviennent :

$$L_\nu^{(i)}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{3(\kappa_{e\nu} - g_\nu \kappa_{d\nu})} \frac{\partial L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} \quad \text{avec} \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (84)$$

et qui expriment les moments d'ordre 1 de manière explicite en fonction du moment d'ordre 0. Dès lors, l'équation (73) régissant le moment d'ordre 0 devient :

$$-\frac{1}{3(\kappa_{e\nu} - g_\nu \kappa_{d\nu})} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_i^2} + \kappa_{a\nu} L_\nu^{(0)}(\mathbf{x}) = 4\pi \kappa_{a\nu} L_\nu^0(T(\mathbf{x})) \quad (85)$$

Cette équation, de la seule inconnue $L_\nu^{(0)}(\mathbf{x})$, est l'équation de volume régissant ce champ ; elle doit être accompagnée de conditions aux limites sur chacune des frontières du domaine de calcul. Nous reprenons ici la formulation assez générale de la condition à la limite radiative mentionnée en introduction (équation (3)) et que nous réécrivons ci-dessous :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \omega / \omega \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} < 0) = \epsilon_{p\nu}(\mathbf{x}) L_\nu^0(T_p(\mathbf{x})) + \frac{1 - \epsilon_{p\nu}(\mathbf{x})}{\pi} \int_{\omega' / \omega' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} > 0} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') (\omega' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}}) d\omega' \quad (3)$$

L'expression à droite du signe égal dans cette équation ne dépend pas de la direction ; donc la condition à la limite (3) impose au champ de luminance $L_\nu(\mathbf{x}, \omega)$ d'être isotrope sur l'hémisphère des directions "entrantes" aux frontières du domaine de calcul, et ceci est incompatible avec la forme générale (69) de l'expression du champ $L_\nu(\mathbf{x}, \omega)$. Plusieurs approches ont été imaginées pour résoudre cette difficulté ; parmi celles-ci, nous détaillons ci-dessous la stratégie proposée par R.E. Marshak [8] et revisitée par A.C. Ratzel et J.R. Howell [9]. Elle consiste à multiplier la relation (3) par $(\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))$

(c'est-à-dire par le cosinus de l'angle entre ω et $(-\mathbf{n}_{\text{ext}})$) puis à intégrer la relation résultante sur l'hémisphère "entrant", ce qui donne :

$$\int_{H_e} L_v(\mathbf{x}, \omega)(\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))d\omega = \epsilon_{pv}(\mathbf{x})L_v^0(T_p(\mathbf{x})) \int_{H_e} (\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))d\omega + \frac{1 - \epsilon_{pv}(\mathbf{x})}{\pi} \int_{H_e} (\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))d\omega \int_{H_s} L_v(\mathbf{x}, \omega')(\omega' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}})d\omega' \quad (86)$$

(les notations H_e et H_s désignent les hémisphères respectivement "entrant" et "sortant"). Dans cette nouvelle équation apparaît par deux fois l'intégrale angulaire $\int_{H_e} (\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))d\omega$, qui vaut π . Par ailleurs, la formulation de la luminance en fonction des moments (69) peut être réécrite en tenant compte des expressions des moments d'ordre 1 (84) d'une part et des coordonnées de ω ($\omega_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\omega_2 = \sin \theta \sin \phi$ et $\omega_3 = \cos \theta$) d'autre part :

$$L_v(\mathbf{x}, \omega) = \frac{1}{4\pi} \left(L_v^{(0)}(\mathbf{x}) - \frac{1}{\kappa_{ev} - g_v \kappa_{dv}} \left(\frac{\partial L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_1} \omega_1 + \frac{\partial L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_2} \omega_2 + \frac{\partial L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_3} \omega_3 \right) \right) = \frac{1}{4\pi} \left(L_v^{(0)}(\mathbf{x}) - \frac{\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{\kappa_{ev} - g_v \kappa_{dv}} \right) \quad (87)$$

Si on injecte cette nouvelle formulation de $L_v(\mathbf{x}, \omega)$ dans les deux intégrales angulaires restantes dans (86), et si on fait le calcul des nouvelles intégrales angulaires apparaissant dans les expressions, on aboutit aux résultats suivants :

$$\int_{H_e} L_v(\mathbf{x}, \omega)(\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))d\omega = \frac{L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{4} + \frac{\mathbf{n}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{grad}_x L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{6(\kappa_{ev} - g_v \kappa_{dv})} \quad (88)$$

$$\int_{H_s} L_v(\mathbf{x}, \omega')(\omega' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}})d\omega' = \frac{L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{4} - \frac{\mathbf{n}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{grad}_x L_v^{(0)}(\mathbf{x})}{6(\kappa_{ev} - g_v \kappa_{dv})} \quad (89)$$

Finalement, après remplacement de $\int_{H_e} (\omega \cdot (-\mathbf{n}_{\text{ext}}))d\omega$ par π et prise en compte des deux résultats ci-dessus, l'équation (86) devient :

$$\mathbf{n}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{grad}_x L_v^{(0)}(\mathbf{x}) = \frac{3\epsilon_{pv}(\mathbf{x})(\kappa_{ev} - g_v \kappa_{dv})}{2(2 - \epsilon_{pv}(\mathbf{x}))} \left(4\pi L_v^0(T_p(\mathbf{x})) - L_v^{(0)}(\mathbf{x}) \right) \quad (90)$$

Cette nouvelle formulation de la condition à la limite (3) implique uniquement le moment d'ordre 0 ainsi que son gradient dans la direction normale extérieure, et est de type Robin. Le système mathématique constitué de l'équation de volume (85) et des conditions aux frontières (90) est à présent clos, et des méthodes numériques standard telles que les différences, éléments et volumes finis permettent de quantifier le champ $L_v^{(0)}(\mathbf{x})$ sur un maillage donné. Le champ de luminance $L_v(\mathbf{x}, \omega)$, exprimé en (87), en découle directement.

Ainsi on vient de voir que dans le cadre de la méthode P_1 , le développement du champ de luminance en série d'harmoniques sphériques compte quatre termes faisant intervenir le moment d'ordre 0 d'une part et les trois moments d'ordre 1 d'autre part, que quatre équations sont nécessaires pour résoudre ces quatre moments et que ce système d'équations doit être clos par une relation de fermeture impliquant le tenseur des moments d'ordre 2. Du fait de la troncature du développement en série d'harmoniques sphériques à un niveau très bas, on conçoit que la méthode P_1 ne soit adaptée que lorsque le champ de luminance est faiblement anisotrope.

Le passage à la méthode P_2 ne se traduit pas par une augmentation sensible de la précision des résultats ; de plus, les méthodes P_N à N pair sont connues pour poser des difficultés importantes lors de l'écriture des conditions aux limites [10].

La méthode P_3 se traduit par seize termes dans le développement du champ de luminance en série d'harmoniques sphériques. Le calcul fait alors intervenir le moment d'ordre 0, les trois moments d'ordre 1, les six moments d'ordre 2 et les dix moments d'ordre 3, lesquels sont régis par vingt équations aux moments. Enfin, une relation de fermeture impliquant le tenseur des moments d'ordre 4 doit être ajoutée pour clore le système mathématique. Le niveau de complexité devient donc très important, ce qui explique pourquoi la très grande majorité des travaux sur les méthodes P_N se sont focalisés sur la méthode P_1 .

3 Années 1970-2000 – phase intermédiaire

3.1 Approche statistique

On peut affirmer sans hésitation qu'au début des années 1970, l'essentiel de ce qui fait la pratique actuelle de la méthode de Monte Carlo était déjà en place. La période qui suit correspond donc avant tout à une phase de maturation. Rien de ce

que nous allons décrire dans cette section ne partira donc pas des algorithmes que nous avons déjà vus dans la section 2.1. Par contre nous allons changer notre regard sur ces mêmes algorithmes et la façon de les optimiser. L'essentiel de ce changement de regard passe par un travail de formulation intégrale : il y aura un aller-retour permanent entre un premier geste qui consiste à traduire un algorithme existant en une formulation intégrale (au point que la formulation remplacera l'énoncé algorithmique) et un second geste consistant à modifier la formulation intégrale, dans l'intention d'aboutir à de meilleurs temps de calcul ou une meilleure convergence, puis traduire l'intégrale en un nouvel algorithme.

Nous ne cherchons pas ici à proposer une revue bibliographique des travaux réalisés dans cette période. Il s'agit seulement d'aider le lecteur à prendre des repères dans une littérature qui peut sinon laisser l'impression d'une collection d'avancées assez mineures avec beaucoup de redites. C'est au contraire une période très riche qui pose la méthode dans toute sa largeur, notamment grâce aux redites, et prépare les liens entre physique, mathématique et informatique qui font la richesse de la période suivante.

3.1.1 Formulation intégrale associée à un algorithme analogue

Dans chacune des figures de la section 2.1 nous avons donné une expression formelle de la grandeur estimée. Cette expression est une traduction de l'algorithme. Si l'algorithme annonce par exemple l'échantillonnage d'une variable aléatoire X , on écrit le motif intégral suivant,

$$\int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) dx \quad (91)$$

où \mathcal{D}_X est l'univers de X (c'est-à-dire le domaine de définition de X) et p_X est la densité de probabilité de X (sa loi). Si l'algorithme se poursuit par l'échantillonnage d'une variable aléatoire Y , sachant que l'échantillonnage de X a donné x , alors on poursuit de la même façon avec

$$\int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) dx \int_{\mathcal{D}_Y(x)} p_Y(y|x) dy \quad (92)$$

où $\mathcal{D}_Y(x)$ est l'univers de Y (qui peut dépendre de x) et p_Y est la densité de probabilité de Y conditionnée par X . On poursuit encore de la même façon si l'algorithme annonce d'autres réalisations de variables aléatoires. Puis l'algorithme se termine par le calcul du poids comme une fonction des valeurs échantillonnées, ici typiquement une fonction de x et y que l'on note $\hat{w}(x, y)$ et dont on donne l'expression. Chaque formulation intégrale a donc une forme semblable à la suivante :

$$A = \int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) dx \int_{\mathcal{D}_Y(x)} p_Y(y|x) dy \hat{w}(x, y) \quad (93)$$

$$\hat{w}(x, y) = \dots$$

où les pointillés sont remplacés par l'expression de la fonction poids. Souvent l'algorithme contient des tests et cette expression du poids doit traduire ces tests. Pour cela on utilise la notation \mathcal{H} : par exemple $\mathcal{H}(x + y > 4)$ prend la valeur 1 si $x + y > 4$ et la valeur 0 sinon.

Un bon exercice consiste à regarder chacune des figures précédentes et contrôler que la formulation intégrale donnée est bien une traduction stricte de l'algorithme au sens que nous venons de donner. On comprend alors une idée essentielle pour la suite : un algorithme de Monte Carlo est entièrement donné par sa formulation intégrale. On peut ainsi éviter les présentations algorithmiques usuelles et se contenter de cette formulation. Elle est auto-suffisante.

Mais pour aller plus loin, on voit aussi que l'expression intégrale est la solution exacte du problème : c'est la forme sous laquelle A est abordée numériquement. On dit qu'un algorithme de Monte Carlo est exact (ou qu'il est sans biais) quand l'expression de A ainsi obtenue est bien rigoureusement la solution recherchée. C'est de cette façon que l'on valide rigoureusement les algorithmes de Monte Carlo qui ont été construits de façon analogue. On a vu en effet que la pratique est souvent celle-ci : dans un premier temps l'algorithme est "justifié" par des considérations physiques très intuitives qui peuvent sembler peu rigoureuses, par exemple aux yeux d'un expert en mathématiques appliquées. Heureusement, on ne s'en arrête pas là. Une fois l'algorithme énoncé, on écrit sa formulation intégrale et on prouve rigoureusement que celle-ci est bien la solution cherchée.

Reprenons l'exemple initial de la section 2.1 où la grandeur estimée est $\phi_\nu(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$, i.e. la puissance émise par la surface \mathcal{S}_0 et absorbée par la surface \mathcal{S}_1 . Le calcul est le même dans l'exemple 4 si on enlève l'absorption. La formulation intégrale est la suivante :

$$\phi_\nu(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) = \int_{\mathcal{S}_0} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{h(\mathbf{x}_0)} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \hat{w}(\mathbf{z}_0) \quad (94)$$

$$\hat{w}(\mathbf{z}_0) = \mathcal{H}(y_0 \in \mathcal{S}_1) \pi \mathcal{S}_0 L_\nu^0(T_0)$$

où $p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{\mathcal{S}_0}$ traduit l'échantillonnage uniforme de \mathbf{x}_0 sur la surface émettrice et $p_{\Omega_0}(\omega_0) = \frac{\omega_0 \cdot \mathbf{n}_0}{\pi}$ traduit l'échantillonnage lambertien de la direction d'émission dans l'hémisphère autour de la normale \mathbf{n}_0 à \mathcal{S}_0 en \mathbf{x}_0 . Pour montrer que l'algorithme estime bien rigoureusement $\phi_\nu(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1)$ il nous faut prouver que l'équation intégrale ci-dessus est exacte. Pour

cela on commence par reporter l'expression du poids dans l'intégrale, sortir $\pi \mathcal{S}_0 L_v^0(T_0)$ de l'intégrale, et on définit l'angle solide $\Omega(\mathcal{S}_1, \mathbf{x}_0)$ sous lequel on voit la surface \mathcal{S}_1 depuis la position \mathbf{x}_0 , ce qui permet de supprimer le test :

$$\phi_v(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) = \pi \mathcal{S}_0 L_v^0(T_0) \int_{\mathcal{S}_0} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{\Omega(\mathcal{S}_1, \mathbf{x}_0)} p_{\Omega_0}(\omega_0) d\omega_0 \quad (95)$$

On remplace alors les densités de probabilité par leurs expressions :

$$\phi_v(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) = \pi \mathcal{S}_0 L_v^0(T_0) \int_{\mathcal{S}_0} \frac{1}{\mathcal{S}_0} d\mathbf{x}_0 \int_{\Omega(\mathcal{S}_1, \mathbf{x}_0)} \frac{\omega_0 \cdot \mathbf{n}_0}{\pi} d\omega_0 \quad (96)$$

Enfin on utilise le changement de variable permettant de passer d'une intégration angulaire sur $\Omega(\mathcal{S}_1, \mathbf{x}_0)$ en une intégration surfacique sur \mathcal{S}_1 , soit $d\omega_0 = \frac{1}{(x_1 - x_0)^2} |\omega_0 \cdot \mathbf{n}_1| dx_1$, où \mathbf{n}_1 est la normale à \mathcal{S}_1 en \mathbf{x}_1 et $\omega_0 = \frac{\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|}$. Cela conduit à

$$\phi_v(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) = \pi \mathcal{S}_0 L_v^0(T_0) \left[\frac{1}{\pi \mathcal{S}_0} \int_{\mathcal{S}_0} d\mathbf{x}_0 \int_{\mathcal{S}_1} dx_1 \frac{(\omega_0 \cdot \mathbf{n}_0) |\omega_0 \cdot \mathbf{n}_1|}{(x_1 - x_0)^2} \right] \quad (97)$$

et on reconnaît entre crochets l'expression usuelle du facteur de forme F_{01} de \mathcal{S}_0 vers \mathcal{S}_1 . On a bien $\phi_v(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_1) = \pi \mathcal{S}_0 L_v^0(T_0) F_{01}$ ce qui valide l'algorithme (l'échange est égal à la puissance émise multipliée par le facteur de forme).

Ce que l'on voit dans cet exemple très simple est directement généralisable :

- Travailler à la conception et l'optimisation d'un algorithme de Monte Carlo sur une base purement intuitive (ce qui est l'essentiel de la pratique) ne pose aucun problème car la validation peut venir comme une seconde étape.
- Cette validation commence par un geste d'écriture très simple qui produit une expression de la grandeur étudiée comme une intégrale sur tous les espaces échantillonnés (cette expression peut d'ailleurs remplacer les énoncés algorithmiques).
- Ensuite il suffit de gestes de reformulation tout-à-fait usuels dans la physique du transfert radiatif pour contrôler que l'expression obtenue est bien rigoureusement égale à l'une des formulations intégrales des solutions du transfert radiatif.

3.1.2 Conception de nouveaux algorithmes à partir de la formulation intégrale

Ce que nous venons de décrire en termes de validation s'appuie avant tout sur le fait qu'il existe des formulations intégrales pour la luminance solution de l'équation de transfert radiatif, que les autres observables que la luminance sont communément des intégrales de la luminance (fréquentielles, spatiales, angulaires, etc) et qu'il est donc toujours possible de poser la question du calcul numérique en termes de calcul intégral. Aussi intuitifs soient-ils, les algorithmes analogues calculent des intégrales.

Mais on comprend facilement qu'il est donc possible d'inverser la proposition : ne plus partir de la vision analogue et partir au contraire de la formulation intégrale elle-même ; travailler la formulation intégrale jusqu'à ce qu'elle ait une forme qui se lit comme un algorithme de Monte Carlo (lui donner la forme d'une espérance).

On pourrait croire que cette inversion conduit à une pratique beaucoup moins intuitive, moins physicienne, plus inspirée de la tradition des mathématiques appliquées. Ce n'est que très partiellement vrai. Lorsque les mathématiciens abordent le calcul intégral sur des domaines d'intégration de dimension élevée, ils font effectivement un travail formel de ce type, mais ils le font en étant guidés par un support intuitif très différent du nôtre. Lorsque les physiciens du rayonnement abordent Monte Carlo sous un angle purement intégral, ils le font à partir des images physiques de la propagation, à partir du formalisme de Green, à partir du formalisme adjoint, etc, donc à partir de toute la physique du linéaire. Donc, non. Le travail sur les écritures intégrales est tout aussi intuitif que celui conduisant aux algorithmes analogues de la première phase de développement de Monte Carlo en rayonnement.

Reprenons notre exemple de l'échange entre deux surfaces. En termes intégraux nous avons au moins trois possibilités :

- intégrer sur la surface émettrice et sur la surface réceptrice : c'est l'expression intégrale usuelle du facteur de forme ;
- intégrer sur la surface émettrice et sur les directions d'émission : c'est la vision propagative directe qui fonde l'algorithme analogue ;
- intégrer sur la surface réceptrice et sur les directions d'arrivée des photons : c'est la vision propagative réciproque, fondée par exemple sur la réciprocité des chemins radiatifs.

Les trois possibilités correspondent à des images physiques très solides et on peut même faire un choix entre les trois, deviner les qualités de convergence, sur la base de ces seules images sans avoir encore écrit la moindre intégrale. On comprend très bien que si la surface réceptrice est de grande taille, si l'angle solide sous lequel on la voit depuis chaque point de l'émetteur est grand, alors la première possibilité va être un bon choix : les photons arriveront souvent au récepteur et la variance sera faible. Au contraire si la surface réceptrice est petite ou très éloignée, alors il est préférable d'inverser la description propagative en partant du récepteur. Mais ce n'est vrai que si l'émetteur est de grande taille, alors effectivement les photons suivis de façon réciproque en partant du récepteur arriveront souvent à l'émetteur et la variance sera faible. Mais si les deux surfaces sont petites et éloignées l'une de l'autre ? Aucune des deux stratégies ne fonctionne. Mais on peut alors choisir la formulation intégrale symétrique, celle où on intègre sur les deux surfaces. Alors la question de photons qui arrivent ou n'arrivent pas sur la surface qu'ils visent n'existe plus. On fixe le point de départ et le point d'arrivée. La question de la variance ne se pose alors plus que via l'expression du poids qui contient les deux cosinus angulaires ainsi que la distance au carré.

Même si cet exemple est simple, il résume parfaitement la pratique. Les images analogues ne sont jamais abandonnées, mais en même temps on n'hésite pas à quitter temporairement les images probabilistes de la section 2.1.3 pour des raisonnements purement intégraux. Surtout, ayant commencé à penser en termes intégraux, on voit tout de suite que la question de la convergence numérique ne peut se dire qu'en des termes qui impliquent l'ensemble du système : reproduire les trajectoires des photons en accord avec leur physique probabiliste conduit inévitablement à des situations à forte variance. On cherche donc à suivre les photons en accord avec l'importance qu'ils ont pour la grandeur étudiée. On cherche la meilleure façon de parcourir les chemins des photons qui comptent le plus. La pensée intégrale porte sur des intégrales de chemins.

3.1.3 Les algorithmes à variance nulle

Posons formellement le concept de chemin. On note γ un chemin d'un photon (par exemple depuis sa position d'émission jusqu'à sa position d'absorption) et on note D_Γ l'espace de tous les chemins existants. Notons $p_\Gamma(\gamma)$ la densité de probabilité du chemin γ (sans détailler ici les moyens de la construire concrètement). On note enfin $\hat{w}(\gamma)$ la fonction poids de Monte Carlo. La formulation intégrale correspondant à l'algorithme de Monte Carlo échantillonnant ces chemins et calculant ce poids est alors la suivante :

$$A = \int_{D_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) d\gamma \hat{w}(\gamma) \quad (98)$$

Ces notations sont choisies afin de faciliter l'aller-retour entre la vision physique usuelle d'un algorithme de Monte Carlo et sa traduction en des termes purement probabilistes. On peut en particulier écrire

$$A = \mathbb{E}(W) \quad (99)$$

c'est-à-dire que la grandeur cherchée A est l'espérance de la variable aléatoire poids W , avec

$$W = \hat{w}(\Gamma) \quad (100)$$

c'est-à-dire que la variable aléatoire poids est définie comme une fonction de la variable aléatoire chemin Γ (bien noter l'utilisation des majuscules lorsqu'il est question de variables aléatoires, par contraste avec une réalisation d'une variable aléatoire qui est toujours notée avec une lettre minuscule).

Nous avons déjà décrit la démarche de validation de l'algorithme, qui consiste à vérifier que l'équation $A = \mathbb{E}(W)$ est bien rigoureusement exacte. La seconde phase consiste à tenter d'accélérer la convergence. Or nous avons déjà vu que pour la méthode de Monte Carlo la convergence se résume à la variance du poids, plus rigoureusement à la variance de la variable aléatoire poids $W = \hat{w}(\Gamma)$. Plus la variance de W est faible, plus l'incertitude de l'estimateur est faible (pour un nombre donné de réalisations). Comment réduire la variance de $W = \hat{w}(\Gamma)$, idéalement comment la réduire à zéro ? La réponse à cette question est ce qu'on appelle un *algorithme à variance nulle*. Cet idéal n'est atteint pratiquement que pour un ensemble de cas très académiques, mais ces cas guident le travail d'amélioration de convergence pour tous les algorithmes de Monte Carlo qui partagent les mêmes familles d'espaces de chemins (intégration fréquentielle, intégration volumique, réflexion multiple, diffusion multiple, etc). En bref, lorsqu'on cherche à améliorer la convergence d'un algorithme de Monte Carlo, on se donne l'objectif d'une variance nulle et on commence par se laisser guider par les propositions existant dans la littérature pour des problèmes voisins.

Il y a essentiellement deux axes de travail lorsqu'on pense en variance nulle, et ces axes sont assez distincts :

- On peut d'abord utiliser la technique de l'échantillonnage par importance, dont nous avons déjà parlé. Avec les notations que nous venons de poser, cette technique consiste à introduire une nouvelle variable aléatoire $\tilde{\Gamma}$, définie sur le même espace de chemins D_Γ , puis à réécrire A de la façon suivante :

$$A = \int_{D_\Gamma} p_{\tilde{\Gamma}}(\gamma) d\gamma \hat{w}(\gamma) = \mathbb{E}(\tilde{W}) \quad (101)$$

avec

$$\hat{w}(\gamma) = \frac{p_{\Gamma}(\gamma)}{p_{\tilde{\Gamma}}(\gamma)} \hat{w}(\gamma) \quad (102)$$

et

$$\tilde{W} = \hat{w}(\tilde{\Gamma}) \quad (103)$$

Il est facile de vérifier que cette nouvelle écriture est rigoureuse pourvu que $p_{\tilde{\Gamma}}$ soit non nulle sur D_{Γ} . L'idée est celle que nous avons déjà énoncée : on échantillonne les chemins autrement et on reste exact en multipliant le poids par le rapport des densités de probabilité. Si l'objectif est la convergence, il s'agit de choisir $\tilde{\Gamma}$ afin que \tilde{W} ait la variance la plus faible. Il est très facile de montrer que l'idéal, c'est-à-dire une variance rigoureusement nulle, correspond au choix d'une variable aléatoire chemin $\tilde{\Gamma}_{ideal}$ de densité de probabilité

$$p_{\tilde{\Gamma}_{ideal}}(\gamma) = \frac{p_{\Gamma}(\gamma)\hat{w}(\gamma)}{\int_{D_{\Gamma}} p_{\Gamma}(\gamma')d\gamma' \hat{w}(\gamma')} = \frac{p_{\Gamma}(\gamma)\hat{w}(\gamma)}{A} \quad (104)$$

En effet, la fonction poids devient

$$\hat{w}_{ideal}(\gamma) = \frac{p_{\Gamma}(\gamma)}{p_{\tilde{\Gamma}_{ideal}}(\gamma)} \hat{w}(\gamma) = \frac{p_{\Gamma}(\gamma)}{\frac{p_{\Gamma}(\gamma)\hat{w}(\gamma)}{A}} \hat{w}(\gamma) = A \quad (105)$$

La fonction poids retourne la solution exacte quelque soit le chemin. La variance est bien nulle : l'algorithme de Monte Carlo est exact dès le premier tirage. Le savoir faire des physiciens du domaine vise à s'approcher de cet idéal. On cherche donc à comprendre la distribution idéale des chemins, puis à s'en rapprocher autant que possible. Cela signifie que l'on cherche à comprendre ce que sont les chemins qui comptent le plus à l'échelle du système, ceux qui contribuent le plus à la grandeur que l'on cherche à estimer, puis on essaye de les échantillonner le plus fidèlement possible. Un point important est que si l'on se trompe dans cette analyse, si on croit que certains chemins sont ceux qui comptent le plus alors que ce n'est pas le cas, alors on le voit sur la variance : au lieu de réduire la variance, on l'augmente. Cette situation est fréquente car il est en effet difficile de penser à l'échelle du système et de deviner ce que sont les chemins préférentiels quand de nombreux ingrédients physiques interviennent dans chaque chemin (il suffit de penser à la diffusion multiple). La pratique est donc que l'on apprend en testant. On propose une interprétation à l'échelle système, on la traduit en un échantillonnage préférentiel des chemins, on code cet échantillonnage, et on regarde si la convergence est effectivement améliorée. Au delà de l'objectif du calcul, pratiquer de cette manière Monte Carlo devient une méthode d'investigation de la physique des chemins.

- Le second axe de travail consiste à travailler sur l'espace des chemins lui-même, et non plus seulement sur son échantillonnage. Nous avons déjà vu dans l'exemple du facteur de forme qu'il était parfois utile de définir les chemins à partir de l'émetteur, à partir du récepteur, ou de façon symétrique à partir des deux surfaces. Ce qui est important dans cet exemple c'est de noter que ce ne sont pas trois façons différentes d'échantillonner les mêmes chemins. Les espaces de chemins sont différents dans les trois cas. Les chemins qui ratent le récepteur dans le premier cas n'existent pas dans les deux autres cas par exemple. Les vrais gros succès de convergence que l'on rencontre dans la littérature sont tous de ce type. Avec l'échantillonnage par importance, sans changer l'espace de chemins, on peut espérer des bénéfices significatifs, mais quand on rencontre une vraie difficulté de convergence c'est toujours en changeant d'espace de chemins que l'on trouve des solutions effectives. Cette phase du travail est encore guidée par le raisonnement en variance nulle. En effet, pour un espace de chemins donné, si on ne parvient pas à comprendre la distribution idéale des chemins, ou si on ne parvient pas à l'approcher par de petits modèles simples disponibles dans la culture du physicien spécialiste du transfert radiatif, alors cela signifie le plus souvent que l'espace des chemins n'a pas été choisi en s'appuyant sur cette culture. Lorsqu'on observe que tout est difficile dans un espace de chemins donné, on quitte la pensée numérique pour réfléchir à ce que la physique du rayonnement nous dit sur le problème, comment face à la même question elle propose des interprétations de la propagation de l'énergie radiative depuis les sources jusqu'à l'observable, et on rediscute le choix de l'espace de chemins sur cette base. Ce sont souvent ces changements de point de vue qui sont au cœur des articles scientifiques sur la méthode de Monte Carlo dans la seconde période (et cela se poursuit aujourd'hui bien évidemment).

3.2 Approche déterministe : méthode des ordonnées discrètes

Les bases théoriques pour la résolution numérique de l'équation de transfert radiatif ayant été posées dans l'après-guerre, les méthodes associées – évoquées précédemment dans la section 2.2 – ont par la suite été consolidées, remaniées, améliorées, et étendues à d'autres pans de la physique, notamment en transfert thermique.

L'évolution exponentielle de la puissance de calcul des ordinateurs à partir de la fin du XX^e siècle – soit entre les années 1970 et 2000 – a permis un autre regard sur la façon dont l'équation de transfert radiatif pouvait être résolue. De façon très schématique, pour ce qui concerne l'approche déterministe, les progrès ont surtout eu lieu sur l'intégration angulaire de

l'équation de transfert radiatif ¹. La méthode des ordonnées discrètes, issue de l'astrophysique, et développée principalement par les neutroniciens, a par la suite été exploitée en rayonnement thermique.

Même si la méthode des harmoniques sphériques P_1 évoquée à la section 2.2.2 est particulièrement intéressante de par sa simplicité de mise en œuvre, surtout parce qu'elle implique peu d'équations à résoudre, son principal inconvénient vient de la troncature trop précoce du développement de la luminance. Cette méthode, qui suppose une certaine isotropie de la luminance, est souvent légitime pour un régime diffusif, mais elle l'est moins lorsque le transfert balistique des photons domine, et lorsque la configuration donne lieu à de fortes anisotropies de luminance. La méthode des ordonnées discrètes a été développée pour pallier ces inconvénients. Nous en présentons ici la formulation la plus classique.

La méthode des ordonnées discrètes consiste à écrire l'équation de transfert radiatif continue, équation (1), pour un ensemble de N_d directions particulières $\omega_m \in \mathcal{S}^2$ et, dans le même temps, à approcher l'intégrale de renforcement par diffusion par une somme discrète s'appuyant sur ces directions pré-établies :

$$\omega_m \cdot \mathbf{grad}_x L_m(\mathbf{x}) = -\kappa_{e\nu} L_m(\mathbf{x}) + \kappa_{a\nu} L^0(T(\mathbf{x})) + \kappa_{d\nu} \sum_{n=1}^{N_d} \xi_n L_n(\mathbf{x}) \Phi_{n,m}. \quad (106)$$

Dans cette équation semi-discrétisée, la luminance en \mathbf{x} selon la direction ω_m , soit $L(\mathbf{x}, \omega_m)$, est ici reformulée en $L_m(\mathbf{x})$ pour des raisons de lisibilité ². La forme approchée du terme intégral est une somme discrète qui s'appuie non seulement sur les directions angulaires pré-établies, ω_m , $m = 1, \dots, N_d$, mais aussi sur un ensemble de poids ξ_m , $m = 1, \dots, N_d$. La fonction de phase de l'équation de transfert radiatif continue, équation (1), s'appuie également sur les directions discrètes; elle est ici écrite de façon condensée par $\Phi_{m,n} := p_{\Omega,\nu}^d(\omega_m|\omega_n)$.

La méthode des ordonnées discrètes consiste donc, après avoir établi judicieusement un ensemble de N_d couples $\{\omega_m, \xi_m\}$, à résoudre un ensemble de N_d équations de transport (106), toutes ces équations étant couplées entre elles, dû à la présence de la somme discrète issue du renforcement par diffusion.

Les conditions aux limites doivent, de la même façon, subir cette étape de discrétisation angulaire. Par exemple, pour une paroi diffuse, la version discrète s'écrit, pour toutes les directions entrantes, c'est-à-dire celles satisfaisant $\omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} < 0$:

$$L_m(\mathbf{x}) = \epsilon L^0(\mathbf{x}) + \frac{1-\epsilon}{\pi} \sum_{\omega_n \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} > 0} \xi_n L_n(\mathbf{x}) |\omega_n \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}}|. \quad (107)$$

Un nombre impressionnant de quadratures ont été développées durant cette phase dite intermédiaire, dans le dernier quart du XX^e siècle, pour approcher l'intégrale continue $\int_{4\pi} f(\omega) d\omega$ par la somme discrète $\sum_{i=1}^{N_d} \xi_i f(\omega_i)$. Nous exposons ici deux types de quadrature très utilisées dans le domaine du rayonnement thermique : la méthode S_n , et une autre basée sur une partition de la sphère unité. Cette partie du cours s'inspire librement de [11].

3.2.1 Quadrature S_n

Cette quadrature classique est intéressante pour la simple raison qu'elle possède 2 invariances par symétrie centrale, et ce, pour chaque octant. La lettre « S » désignant cette quadrature souligne le terme « symétrie », tandis que l'indice n est un paramètre de raffinement. La construction de la quadrature S_n est particulièrement bien détaillée dans l'ouvrage de Lee [12, chapitre 3]. Cette quadrature a été plusieurs fois revue et améliorée en termes d'invariances de rotation de la sphère unité [13]. Dans la construction de la quadrature S_n , il s'agit, d'une part, de définir les directions de propagation, et, d'autre part, les poids associés.

Directions de S_n

La quadrature S_n s'appuie sur la propriété suivante.

Propriété Si la direction $\omega_m = (\mu_i, \eta_j, \zeta_k)$ appartient à la quadrature, alors

- toutes les directions $(\pm\mu_i, \pm\eta_j, \pm\zeta_k)$ appartiennent également à la quadrature, par symétries;
- les directions (μ_i, ζ_k, η_j) , (η_j, μ_i, ζ_k) , (η_j, ζ_k, μ_i) , (ζ_k, μ_i, η_j) , et (ζ_k, η_j, μ_i) appartiennent également à la quadrature, par permutations.

1. Le traitement de l'opérateur de transport – essentiellement par différences finies et volumes finis – n'a cessé d'évoluer mais, par rapport à son pendant angulaire, les développements ont été moindres dans cette phase intermédiaire (années 1970-2000).

2. Notons par ailleurs que, également pour des raisons de lisibilité, les dépendances spectrales ont aussi été ôtées.

La construction de la quadrature S_n peut donc se faire sur un octant seul, les directions portées par les autres octants se déduisant de celles portées par un premier octant. Pour l'un des octants, – prenons pour simplifier le positif, c'est-à-dire celui tel que $\mu > 0, \eta > 0$ et $\zeta > 0$, pour chaque direction d'espace, $n/2$ niveaux sont tout d'abord évalués, cf. figure 10 à gauche. (On notera qu'il y a un total de $n(n+2)/8$ directions par octant; les directions peuvent être représentées par l'indication des trois indices i, j , et k pour signifier le niveau atteint selon les trois directions x, y , et z ; le symbole $\binom{i}{j}{k}$ est utilisé pour des questions de lisibilité.)

Proposition Les deux relations suivantes, équations (108) et (109), permettent, pour tout entier pair n , de construire toutes les directions à partir d'un premier cosinus directeur μ_1 .

$$i + j + k = \frac{n}{2} + 2 ; \quad (108)$$

$$\mu_i^2 + \eta_j^2 + \zeta_k^2 = 1. \quad (109)$$

Remarque La relation (108) s'obtient par construction, tandis que la relation (109) considère des directions unitaires.

Remarque L'existence d'une direction au centre de l'octant, c'est-à-dire qui vérifie $i = j = k$, implique que $\frac{n+4}{6} \in \mathbb{N}$, soit $n \in 2\mathbb{N}$.

Preuve Les équations (108) et (109) donnent, $\forall k + 1 \in [1, \frac{n}{2} [$:

$$\begin{cases} \mu_i^2 + \eta_{j-1}^2 + \zeta_{k+1}^2 = 1 ; \\ \mu_{i-1}^2 + \eta_j^2 + \zeta_{k+1}^2 = 1. \end{cases} \quad (110)$$

La soustraction de ces 2 égalités donne la relation d'invariance suivante :

$$\mu_i^2 - \mu_{i-1}^2 = \eta_j^2 - \eta_{j-1}^2, \quad (111)$$

soit :

$$\Delta := \mu_{n/2}^2 - \mu_{n/2-1}^2 = \dots = \mu_2^2 - \mu_1^2. \quad (112)$$

La somme des dernières égalités de (112) donne :

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + (i-1)\Delta. \quad (113)$$

L'introduction de cette dernière relation (113) dans (109) donne :

$$\mu_1^2 + (i-1)\Delta + \mu_1^2 + (j-1)\Delta + \mu_1^2 + (k-1)\Delta = 3\mu_1^2 + (i+j+k-3)\Delta = 1, \quad (114)$$

puis, l'introduction de équation (108) dans (114) donne :

$$3\mu_1^2 + \left(\frac{n}{2} - 1\right)\Delta = 1, \quad (115)$$

soit :

$$\Delta = \frac{2}{n-2}(1 - 3\mu_1^2). \quad (116)$$

Nous avons donc une formulation analytique de Δ en fonction de μ_1 , pour un paramètre n . Ainsi, pour tout entier naturel pair n , la connaissance du premier cosinus μ_1 permet la détermination de toutes les autres directions de la quadrature. \square

Remarque La contrainte $0 \leq \mu_1^2 \leq 1/3$ associée aux équations (113) et (116) implique $\mu_1^2 \leq \mu_2^2 \leq \dots \leq \mu_{n/2}^2$.

Remarque Parmi d'autres possibilités, Lee [12] a proposé l'initialisation :

$$\mu_1^2 := \frac{1}{3(n-1)}. \quad (117)$$

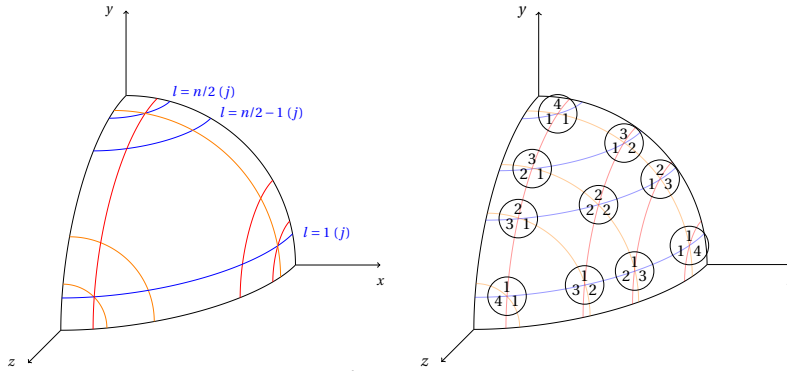


FIGURE 10 – Construction des directions ω_m sur un octant – ici pour S_8 . À gauche : représentation des niveaux ; à droite : numérotation des niveaux selon les trois axes. Ces figures sont issues de [14].

Poids de S_n

Tout d'abord, toutes les directions se déduisant l'une de l'autre par symétrie ont le même poids. De plus, les poids sont tels qu'ils vérifient :

$$\sum_{i=1}^{N_d} \xi_i := 4\pi = \int_{4\pi} d\omega ; \quad (118)$$

$$\sum_{i=1, \mu_i > 0}^{N_d} \xi_i \mu_i := \pi = \int_{2\pi, \mu > 0} \mu d\omega ; \quad (119)$$

$$\sum_{i=1}^{N_d} \xi_i \mu_i^{2p} := \frac{4\pi}{2p+1} = \int_{4\pi} \mu^{2p} d\omega. \quad (120)$$

Remarque La contrainte (118) permet de bien représenter l'émission radiative au sein du milieu.

Remarque La contrainte (119) permet une bonne précision du flux sur une paroi perpendiculaire à l'axe des x , des y , ou des z .

Remarque Les contraintes additionnelles (120) sont la conservation des moments d'ordre pair.

Exemple La quadrature S_2 a une seule direction par octant ; le poids associé est déterminé par la seule contrainte (118).

Exemple La quadrature S_8 a trois directions indépendantes par octant (par exemple $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$, et $\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$) ; les trois poids associés sont déterminés par les contraintes (118), (119) et une de (120) (cette dernière étant écrite par exemple pour $p = 1$).

Remarque Les quadratures S_n sont le plus souvent limitées à S_{12} car, au-delà, la construction donne malheureusement des poids négatifs.

Remarque Le plus souvent, les quadratures S_n figurent dans des tables, celles-ci étant fournies dans tous les ouvrages de référence traitant du transport radiatif.

3.2.2 Partitionnement de la sphère

Une alternative aux quadratures numériques consiste à partitionner la sphère unité, sans chercher outre mesure à respecter les conditions de symétrie, de flux, et de moment. Ces méthodes ne peuvent donc pas être appelées quadratures en tant que telles, mais l'usage est tel que ce terme est tout de même souvent utilisé, un peu abusivement.

Le principal avantage de ces méthodes se basant sur le partitionnement (on parle aussi de discrétisation) de la sphère unité vient, entre autres, du fait que, là où les quadratures ne sont pas évidentes à construire, partitionner la sphère est le plus souvent aisé.

De nombreuses solutions ont été proposées dans ce domaine ; nous en donnons ici quelques exemples.

Discrétisation des angles polaires. La sphère unité représentée par les angles polaires $\phi \in [0, 2\pi]$ et $\theta \in [0, \pi]$ est discrétisée en n_ϕ et n_θ intervalles constants, de sorte que les directions discrètes, considérées aux centres des intervalles, sont $\phi_m = \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{n_\phi}$ et $\theta_n = \left(n - \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{n_\theta}$, et les cosinus directeurs discrets valent :

$$\begin{aligned}\mu_{m,n} &= \sin \theta_n \cos \phi_m ; \\ \eta_{m,n} &= \sin \theta_n \sin \phi_m ; \\ \zeta_n &= \cos \theta_n.\end{aligned}\tag{121}$$

Les poids associés à ces directions discrètes sont les mesures des quadrangles sphériques :

$$\xi_{m,n} = \int_{\phi_{m-\frac{1}{2}}}^{\phi_{m+\frac{1}{2}}} \int_{\theta_{n-\frac{1}{2}}}^{\theta_{n+\frac{1}{2}}} \sin \theta \, d\theta \, d\phi.\tag{122}$$

Cette méthode de partitionnement en angles polaires respecte la condition de symétrie par rapport aux plans principaux (θ et ϕ égaux à 0 et $\frac{\pi}{2}$) mais, en revanche, il n'y a pas invariance par permutation selon les axes principaux, et la répartition des directions discrètes est concentrée près des pôles, ce qui implique, implicitement, un traitement différent autour de l'axe vertical $\theta \approx 0$ et proche du plan horizontal $\theta \approx \frac{\pi}{2}$, cf. figure 11-a. Le moment d'ordre 0 (118) et le moment d'ordre 1 (nul) sont respectés mais le demi-moment d'ordre 1 (119), quant à lui, ne l'est pas ; il n'est qu'approché, l'erreur étant en $O(\delta\theta^2, \delta\phi^2)$.

Remarque *La concentration des directions discrètes près des pôles peut être corrigée en discrétisant non pas l'angle θ lui-même mais son cosinus, soit $\zeta = \cos \theta$, sur l'intervalle $[-1, 1]$, par pas constants $\delta\zeta = \frac{2}{n_\zeta}$, pour que $\zeta_n = -1 + \left(n - \frac{1}{2}\right) \delta\zeta$. Le poids associé à la direction (m, n) devient ainsi $\delta\zeta \delta\phi$, et les deux autres directions angulaires s'expriment par :*

$$\begin{aligned}\mu_{m,n} &= \sqrt{1 - \zeta_n^2} \cos \phi_m ; \\ \eta_{m,n} &= \sqrt{1 - \zeta_n^2} \sin \phi_m.\end{aligned}\tag{123}$$

Cette version corrigée est représentée graphiquement dans la figure 11-b.

Partitionnement de la sphère unité à partir des directions fournies par la quadrature S_n . Cette méthode, détaillée dans [12], et présentée schématiquement dans la figure 11-c, respecte les conditions de symétrie et de permutation, ainsi que les premiers moments pairs. Cependant, même si les conditions supérieures de moment ne sont pas satisfaites, il est possible, ainsi, de discrétiser la sphère aussi finement que nécessaire, sans que des poids négatifs n'apparaissent.

Discrétisation T_n de Thurgood. Présentée en 1995 [15], cette discrétisation possède, tout comme S_n , une symétrie par rotation. La discrétisation T_n s'appuie sur une subdivision successive des triangles avant projection sur la sphère ; les directions sont les barycentres des triangles sphériques. Cette discrétisation est illustrée dans la figure 11-d.

Division successive d'un des cinq polyèdres réguliers. L'utilisation d'un polyèdre régulier en le divisant de façon successive permet d'obtenir une triangulation pour laquelle les éléments ont tous le même poids. De même que pour la discrétisation de Thurgood, les directions sont les barycentres des triangles sphériques ; la figure 12 présente les quatre premiers niveaux de raffinement, pour l'octaèdre (en haut) et l'icosaèdre (en bas).

Méthode des volumes finis. La méthode des volumes finis est bien souvent évoquée comme alternative à la quadrature S_n associée aux ordonnées discrètes. Cette méthode correspond en fait à un partitionnement de la sphère unité, les poids associés aux directions discrètes étant les aires sphériques des polygones associés.

3.2.3 Éléments de comparaison

Seule la quadrature S_n et quelques autres méthodes basées sur le partitionnement de la sphère unité ont été présentées ici. Toutes ces méthodes ont été construites en vue de résoudre l'équation de transfert radiatif selon un ensemble fini de directions discrètes. Un nombre important d'autres méthodes peut être trouvé dans la littérature ; le célèbre papier de R. Koch et R. Becker, publié en 2005, en donne un certain nombre, avec des éléments de comparaison [16]. Ces comparaisons s'appuient essentiellement sur des calculs d'erreur sur les moments d'ordre pair, ainsi que sur les demi-moments, pour toute direction $\omega \in \mathcal{S}^2$ (pas seulement selon les directions de la quadrature). Il en ressort que la quadrature dénommée LC11, proposée par Lebedev, est la plus précise, pour le critère portant sur les moments. L'une des particularités de cette quadrature de Lebedev vient du fait que les poids sont tous égaux, les directions discrètes étant quant à elles ajustées de façon ad hoc.

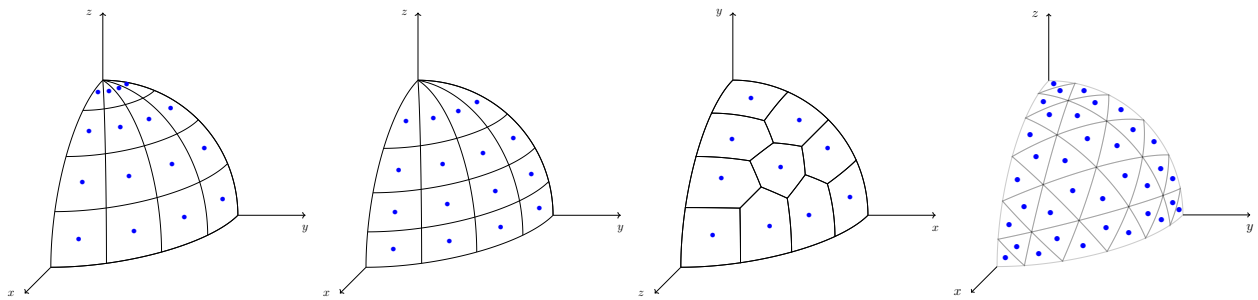


FIGURE 11 – Partitionnement de la sphère unité (seul l’octant positif est ici représenté). De gauche à droite : a) discrétisation uniforme des angles polaires, b) discrétisation corrigée des angles polaires, c) méthode S_n modifiée, d) discrétisation T_n de Thurgood.

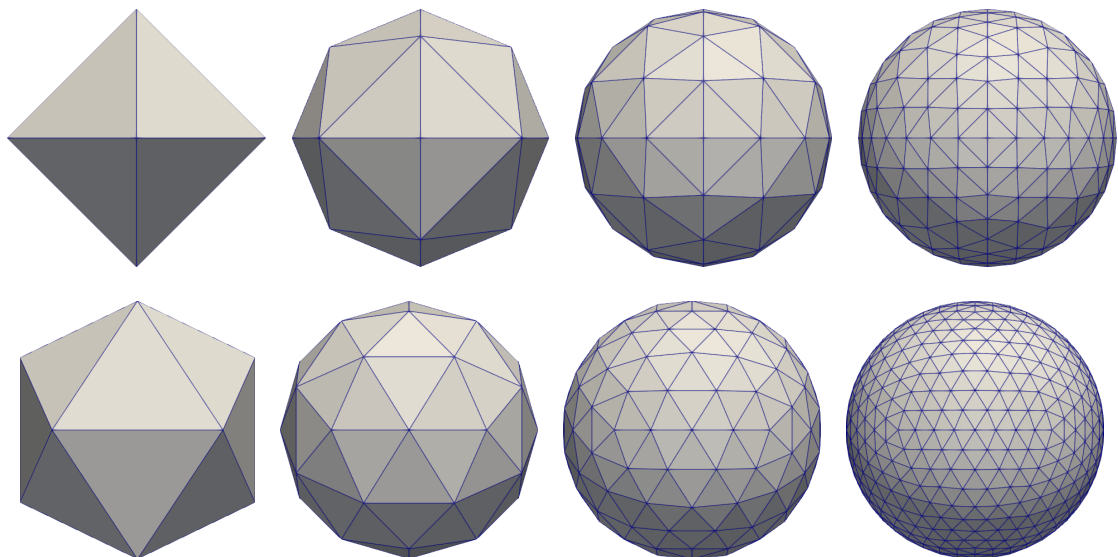


FIGURE 12 – Partitionnement de la sphère unité à partir de l’octaèdre (en haut) et de l’icosaèdre (en bas). De gauche à droite : polyèdre régulier initial, puis niveaux de raffinement 1, 2, et 3. Pour l’octaèdre, le nombre de directions initial est 8 ; pour l’icosaèdre, le nombre de directions initial est 20. À chaque étape de raffinement, le nombre de directions est multiplié par 4.

Contrairement à la quadrature S_n , un partitionnement de la sphère unité ne permet pas de respecter toutes les conditions de conservation des moments et demi-moments. Toutefois, un partitionnement de la sphère unité permet, en général, de pouvoir travailler avec un nombre de directions aussi élevé que l'on souhaite, et les poids sont tous positifs. Un autre avantage, et non des moindres, est que ces méthodes sont moins affectées par l'effet de rayon, effet dont on parle un peu plus loin, la raison étant une plus grande homogénéité de la distribution des poids sur la sphère unité.

Enfin, une autre raison pour laquelle une méthode basée sur la partition de la sphère peut être préférée est sa simplicité de mise en œuvre. Vues sous un angle éléments finis, ces méthodes peuvent être étendues, au moins théoriquement, à des ordres d'approximation supérieurs, et des calculs formels permettent des estimations d'erreur [17, 18]. Ainsi, l'erreur associée à la discrétisation angulaire est d'autant plus faible que la discrétisation est fine, c'est-à-dire quand N_d est grand.

Dans les ordonnées discrètes, le dilemme est de choisir entre une grande précision obtenue grâce à une discrétisation angulaire fine (grand N_d) et un calcul modéré obtenu pour une discrétisation angulaire plus grossière (faible N_d). En pratique, un faible nombre de directions discrètes peut être choisi lorsque le milieu est très diffusant. En revanche, lorsque le milieu semi-transparent est presque transparent (faible absorption et faible diffusion) l'effet de raie apparaît pour une trop grossière discrétisation angulaire. Cet artefact numérique, qui vient de la discrétisation angulaire elle-même (une fonction variant continûment selon ω est réduite à une fonction discrète constante par morceaux), conduit à des solutions non monotones en espace [19, 20].

Cet effet de raie est souvent évoqué en même temps qu'une autre source d'erreur, celle associée à la diffusion numérique³ qui, elle, ne dépend pas de la discrétisation angulaire mais uniquement du schéma de discrétisation spatiale. Au contraire de l'effet de raie, la diffusion numérique tend à lisser les luminances et à en amoindrir des gradients, là où l'effet de raie tend à augmenter les discontinuités et gradients des champs de luminance. Dans la pratique, il y a en fait interaction entre ces deux phénomènes, et leurs effets peuvent être compensés [21].

L'erreur globale sur la solution ne peut être baissée que si l'erreur de discrétisation est réduite à la fois en spatial et en angulaire ; la réduction de l'erreur sur une seule composante sans prendre en compte l'autre composante ne permet pas une réduction globale de l'erreur sur la solution ; il s'agit alors de raffiner la discrétisation angulaire pour amoindrir l'effet de raie, et, en même temps, de raffiner la discrétisation spatiale pour amoindrir l'effet de diffusion numérique. L'exemple suivant, issu de [22] et mis en place à des fins de vérification de code par la méthode dite des solutions manufacturées, illustre cette combinaison d'effets.

Exemple Soit un milieu semi-transparent fictif bi-dimensionnel pour lequel $\kappa_{dv} = 2\kappa_{av}$ et une fonction de phase anisotrope vérifiant $p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega') = \frac{1}{2\pi} \frac{2+\omega \cdot \omega'}{2}$. La luminance théorique est choisie telle que $\widehat{L}_\nu(\mathbf{x}, \omega) = 1 + \sin(2\kappa_{av}\pi x) \sin(2\kappa_{dv}\pi y)$. La source (fictive) qui satisfait cette luminance théorique est $\kappa_{av}L_\nu^0(\mathbf{x}) = \cos\theta 2\kappa_{av}\pi \cos(2\kappa_{av}\pi x) \sin(2\kappa_{dv}\pi y) + \sin\theta 2\kappa_{dv}\pi \sin(2\kappa_{av}\pi x) \cos(2\kappa_{dv}\pi y) + \kappa_{av}(1 + \sin(2\kappa_{av}\pi x) \sin(2\kappa_{dv}\pi y))$. Pour ce test, nous avons considéré $\kappa_{av} = 1$ et le domaine carré de côté unitaire. L'erreur $L^2(\mathcal{D})$ définie par les relations (124) est calculée par rapport à la densité radiative théorique $\widehat{G}(\mathbf{x}) = \oint_{2\pi} \widehat{L}_\nu(\mathbf{x}, \omega) d\omega = 2\pi(1 + \sin(2\kappa_{av}\pi x) \sin(2\kappa_{dv}\pi y))$.

$$e(G) = \frac{\|G - \widehat{G}\|_{L^2(\mathcal{D})}}{\|\widehat{G}\|_{L^2(\mathcal{D})}} ; \|G\|_{L^2(\mathcal{D})} = \left(\int_{\mathcal{D}} G^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (124)$$

Cette erreur est tracée en fonction de la taille de maille en angulaire (cf. figure 13 à gauche) et en spatial pour un schéma de type éléments finis (cf. figure 13 à droite). L'effet du raffinement en angulaire à partir d'une discrétisation uniforme montre que ce schéma est d'ordre 2 (pour l'erreur $L^2(\mathcal{D})$ portant sur la densité, et avec une solution ne présentant pas de discontinuité particulière). De façon tout-à-fait similaire, l'effet du raffinement en spatial montre que ce schéma est également d'ordre 2 (même erreur $L^2(\mathcal{D})$ portant sur la densité, avec une solution ne présentant pas de discontinuité particulière).

Ces deux figures mettent bien en évidence l'existence de plateaux qui soulignent combien il serait vain de ne raffiner que le maillage spatial ou de ne raffiner que le maillage en angulaire de la sphère unité.

4 Années 2000-2020 – phase actuelle et recherches en cours

4.1 Approche statistique

La période actuelle est caractérisée par une exploitation, plus systématique encore, des travaux de formalisation de la période précédente. Rien n'est perdu des algorithmes analogues initiaux. On peut même défendre l'idée inverse : les efforts de formalisation ont donné une place essentielle aux concepts de processus, d'espace de chemins, et le suivi analogue de photons retrouve ainsi une nouvelle force intuitive, offrant plus de souplesse, notamment en termes de couplage et d'analyse. De façon assez inattendue, une part significative de ces avancées dans le champ de la physique est venue d'une

3. Le terme « false scattering » est souvent utilisé pour désigner ce phénomène de diffusion numérique.

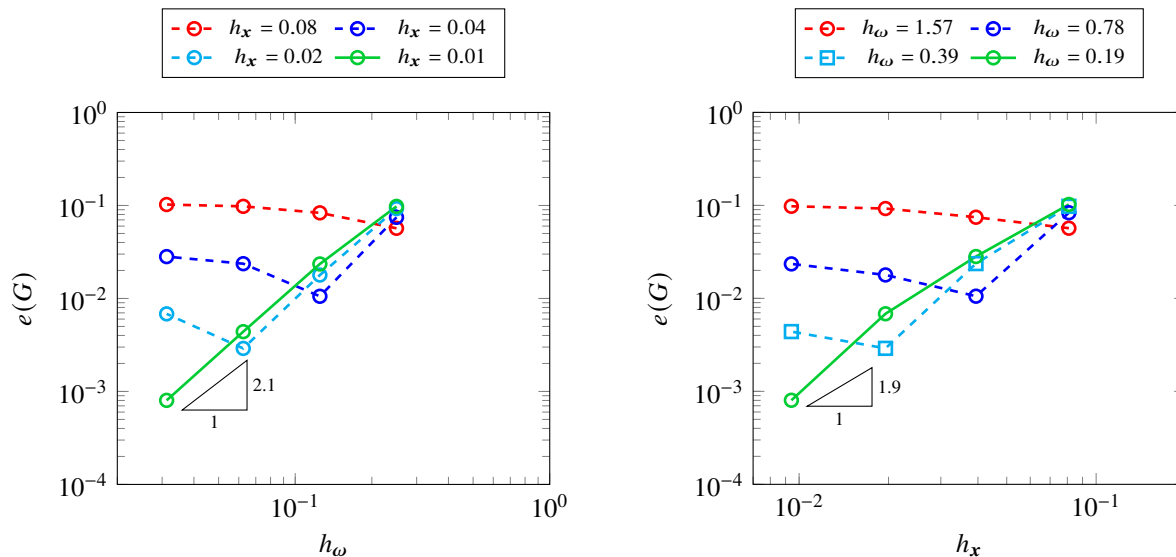


FIGURE 13 – Gauche : erreur $e(G)$ en fonction de la taille des triangles sphériques $h_\omega \approx \frac{2\pi}{N_d}$; droite : erreur $e(G)$ en fonction de la taille des éléments finis h_x .

communauté non physicienne (mais qui le devient à grands pas) : la communauté de l'informatique graphique. Nous décrivons brièvement ici l'arrivée de cette communauté, les principales briques de la pensée en chemins/processus, ainsi que le renouveau des techniques d'analyse.

Comme pour la période précédente, nous n'avons aucune prétention à l'exhaustivité et il ne s'agit pas d'une revue rigoureuse des activités de recherche actuelles, seulement d'une aide à la lecture.

4.1.1 L'arrivée de l'informatique graphique

La question de produire informatiquement des images pour les industries du jeu vidéo et du cinéma est au premier plan des recherches en informatique graphique depuis très longtemps, bien avant les années 2000. Et pourtant cette recherche était pour l'essentiel très éloignée de la nôtre. Il y a deux raisons, impossibles à séparer complètement l'une de l'autre, qui font que cette situation a changé aujourd'hui. La première raison est que les avancées graduelles de la méthode de Monte Carlo ainsi que l'augmentation de la puissance des calculateurs ont fait que la méthode a commencé à devenir praticable dans un nombre croissant de contextes applicatifs. Or de par sa dimension statistique, la méthode dispose d'excellentes propriétés en termes de gestion des complexités géométriques : comme l'énoncé de l'algorithme ne fait intervenir aucun maillage (on ne discrétise pas l'équation de transfert radiatif, on suit des rayons dans une scène) et du fait de cette absence de maillage il n'y a assez fondamentalement aucune différence entre un algorithme de suivi de photons au sein d'une géométrie élémentaire (un cube par exemple) ou une géométrie décrite à l'aide de millions de triangles ou de tétraèdres. Lorsque les informaticiens ont senti que la méthode devenait praticable, ils ont donc tout de suite imaginé qu'elle pouvait devenir une méthode numérique insensible à la complexité géométrique, insensible aux rapports d'échelles géométriques. La seconde raison est très voisine de celle qui a installé Monte Carlo en physique : il est facile de modifier les algorithmes pour complexifier la description physique des surfaces et s'approcher d'images construites à l'aide de modèles physiques réalistes (de "vraies" propriétés de surface, de "vraies" propriétés de volume). Ce n'était pas du tout le cas avec les techniques qu'utilisait l'informatique graphique avant Monte Carlo : pour obtenir une image donnée (un rendu donné) il fallait que les artistes jouent avec le manque de lien direct entre les matériaux choisis, les lampes choisies, et l'image elle-même. L'artiste devait être informaticien pour obtenir l'image qu'il souhaitait. Monte Carlo représentait donc l'espoir d'un rendu physiquement réaliste, d'artistes pouvant exprimer leurs attentes en les mêmes termes que lors de leurs échanges avec les décorateurs, en parlant de matériaux et de sources de lumière usuels.

Vingt années de recherche plus tard, d'une recherche très intense, l'objectif est atteint avec des algorithmes de rendu physiquement réalistes dont les temps de calcul sont insensibles au niveau de raffinement des descriptions géométriques et physiques (dans la littérature cet objectif porte la dénomination "Teapot in a Stadium"). Les figures 14, 15, 16 et 17 illustrent brièvement ces avancées avec deux images emblématiques des rapports d'échelles quasi-infinis (entre le détail d'un brin d'herbe ou d'une feuille et l'échelle de la scène en cinéma ; entre la petite échelle de la description du sol, la petite échelle de la turbulence nuageuse, et l'échelle de l'impact radiatif d'une scène nuageuse), un exemple de temps de calcul pour différents niveaux de raffinement d'une surface (temps de calcul invariants) et un exemple de temps de calcul pour différents niveaux de raffinement d'un champ volumique (temps de calcul également invariants). En pratique, aujourd'hui la quasi-intégralité des algorithmes de rendu utilisés par l'industrie du cinéma sont des algorithmes de Monte Carlo et ces algorithmes font graduellement leur entrée dans le monde du jeu vidéo sous la dénomination "Monte Carlo Ray Tracing",



FIGURE 14 – Teapot in a Stadium. Cette image est produite par l’algorithme décrit dans le livre de Matt Pharr et al. "Physically Based Rendering : from Theory to Implementation" [23]. Rapports d’échelles quasi-infinis entre le détail d’un brin d’herbe ou d’une feuille et l’échelle de la scène en cinéma. Gauche : image non résolue, i.e. avec un nombre insuffisant de générations aléatoires. Droite : image résolue.



FIGURE 15 – Teapot in a Stadium. Cette image est produite par l’algorithme décrit dans [24]. Rapports d’échelles quasi-infinis entre la petite échelle de la description du sol, la petite échelle de la turbulence nuageuse, et l’échelle de l’impact radiatif d’une scène nuageuse.

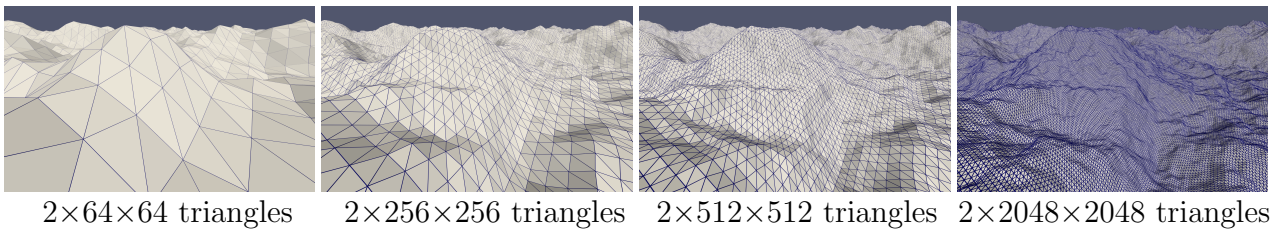
avec des processeurs graphiques dédiés à Monte Carlo dès leur conception.

4.1.2 Espace de chemins, formulation en processus, couplage et non-linéarité

Pour la période précédente, nous avons insisté sur le fait que le formalisme intégral tenait une place de plus en plus importante dans la pratique de la méthode. Cela s’est notamment traduit par un discours qui s’est graduellement affiné autour du concept d’espace de chemins. Les physiciens du rayonnement se sont alors retrouvés à faire des passerelles avec d’autres branches de la physique et des mathématiques dans lesquelles les mêmes concepts étaient mis en avant. Le travail bibliographique des informaticiens de la synthèse d’image est aussi venu renforcer cette tendance.

Dans un premier temps cela s’est traduit concrètement par une modification du vocabulaire et des choix de présentation formelle. Le point de départ de tout algorithme de Monte Carlo est devenu une intégrale de chemin, la dimension aléatoire de chaque chemin s’énonçant de plus en plus naturellement en termes de processus, i.e. la position et la direction du photon étant une fonction aléatoire du "temps" (le temps étant le plus souvent remplacé par une abscisse curviligne). Le plus gros bénéfice que nous avons tiré de ce travail d’ancrage théorique a été la capacité à faire des liens avec des domaines de recherche où la méthode de Monte Carlo est pratiquée communément, mais pour des physiques très éloignées de la physique du transport particulaire (quantique, électromagnétisme, réaction-diffusion). Les spécialistes de Monte Carlo en transfert radiatif (ou en neutronique par exemple) qui se percevaient comme des spécialistes du transport linéaire ont alors pris conscience que leur savoir-faire avait une valeur plus large et ont petit-à-petit investi d’autres territoires, ce qui a avant tout eu deux conséquences majeures en retour pour le transfert radiatif :

a) Ground geometries representing orography



b) Relative rendering time of scenes of increasing complexity

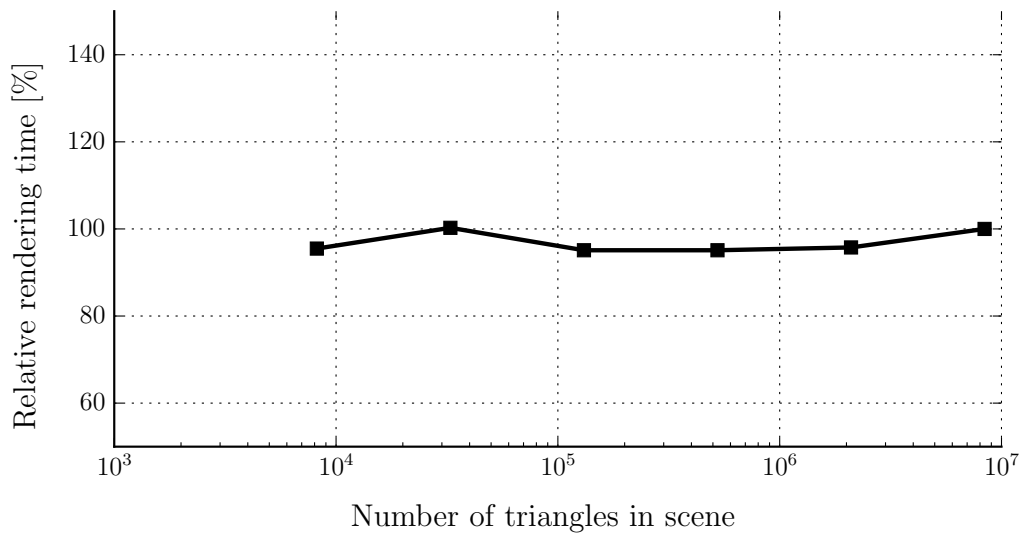
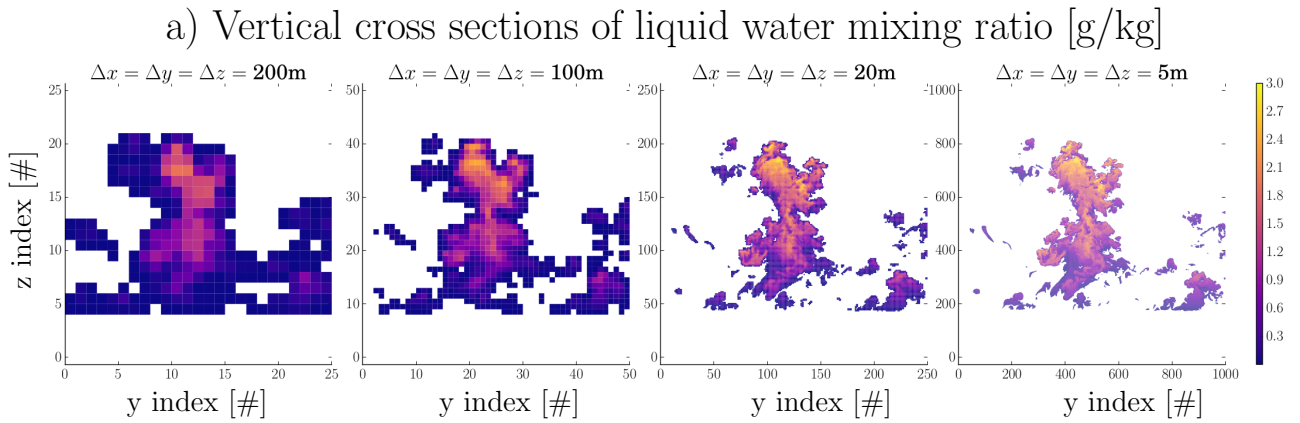


FIGURE 16 – Insensibilité des temps de calcul au niveau de raffinement de la description géométrique des surfaces pour l'exemple de scène nuageuse de la figure 15.



b) Relative rendering time of scenes of increasing resolution

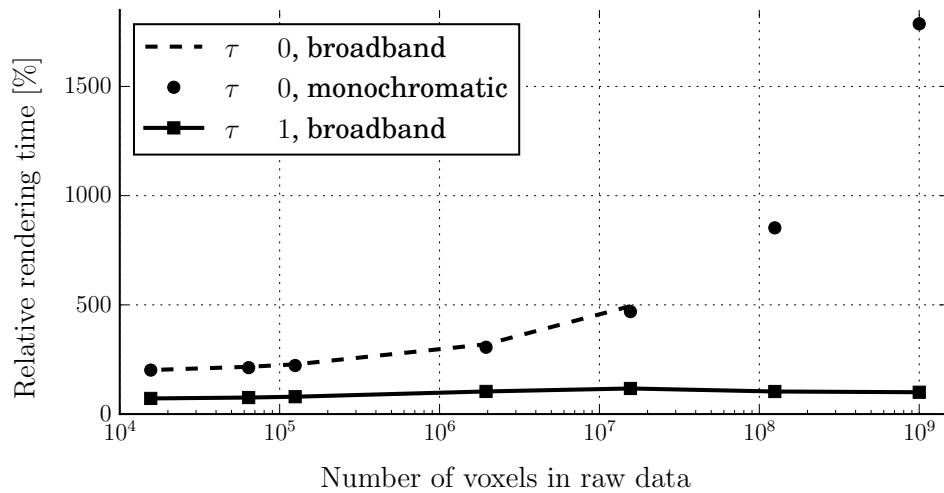


FIGURE 17 – Insensibilité des temps de calcul au niveau de raffinement de la description géométrique des champs volumiques pour l'exemple de scène nuageuse de la figure 15.

- Il est devenu possible de penser à des algorithmes de Monte Carlo ne simulant pas seulement le transport de photons mais aussi d'autres physiques : celles qui interagissent communément avec le transfert radiatif. On peut typiquement se poser la question de concevoir un algorithme de Monte Carlo unique (un espace de chemins unique) pour le problème du couplage entre conduction thermique, convection et rayonnement, i.e. un algorithme unique dont la solution est une température ou une luminance solutions d'une thermique couplée. De même il a commencé à être envisageable de coupler le rayonnement avec une réaction chimique, avec un modèle biologique de photo-réaction. Enfin l'idée est aussi apparue de ne pas précalculer les propriétés radiatives lorsque celles-ci viennent de l'électromagnétisme (sections efficaces d'absorption et de diffusion pour des distributions de particules ou de gouttes) ou de la spectroscopie (spectres de raies d'émission/absorption des gaz moléculaires) : le problème posé devient un problème couplé transfert radiatif/électromagnétisme/spectroscopie et les besoins de tabulation des propriétés radiatives disparaissent (ainsi que les sources d'incertitude qui leur sont associées).
- La question du non-linéaire a fait son entrée dans le champ de réflexion. Bien sûr, la physique du transport de photons, celle qui nous concerne en tant que thermiciens, prise isolément est sans ambiguïté une physique linéaire. Par contre le couplage avec les physiques que nous venons de lister induit des non-linéarités, typiquement celle de la température à la puissance quatre dans le couplage conducto-convecto-radiatif ou celle de la loi exponentielle de Beer lors du couplage avec l'électromagnétisme et la spectroscopie. Or Monte Carlo est réputé rencontrer des difficultés tout-à-fait spécifiques face à aux non-linéarités. La synthèse d'image ouvre la porte vers des scènes d'une complexité quasi-infinie, la pensée en chemins permet le couplage de plusieurs physiques dans cette complexité géométrique, mais les questions d'ingénierie correspondantes (qui sont nombreuses avec de forts enjeux) font presque systématiquement apparaître des couplages non-linéaires. La question de définir des espaces de chemins à partir d'un problème non-linéaire est donc devenue une question centrale pour les physiciens du rayonnement qui n'en avaient presque aucunement l'habitude.

4.1.3 La question de l'analyse

Avec la pensée en espace de chemins est aussi venue l'idée de "faire parler les chemins", dans un objectif d'analyse. Monte Carlo définit un espace de chemins, des chemins probabilisés, pour estimer un observable physique, typiquement un flux de chaleur ou un profil de température qu'un ingénieur souhaite comprendre et optimiser. Au delà de l'estimation, au delà du calcul lui-même, ne peut-on pas regarder les chemins échantillonnés pour mieux comprendre par où passe la chaleur, les raisons d'un point chaud, etc ? Puisque les chemins sont probabilisés, ne peut-on pas regarder les probabilités comme un ingrédient de la compréhension et de l'optimisation souhaitée ?

Cette idée est ancienne, mais la pensée en chemins la renforce considérablement. En effet, comprendre une physique dont le modèle se dit en termes probabilistes à partir d'échantillons des variables aléatoires correspondantes passe par la définition d'une question statistique (au sens rigoureux du terme par contraste avec "probabilistes"). Nous sommes donc aujourd'hui en mesure de définir de telles questions sur la base de processus définis de façon rigoureuse et cela nous ouvre là encore les portes d'une littérature très riche.

Au stade actuel, deux lignes de réflexion méritent une mention particulière dans ce domaine : les calculs de sensibilités et les calculs symboliques. La première traduction concrète de cette pensée statistique a conduit à la définition des sensibilités de la grandeur étudiée aux paramètres du problème. Admettons que l'algorithme de Monte Carlo considéré estime une grandeur A qui dépend de paramètres $\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_N$, soit $A \equiv A(\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_N)$. La sensibilité de A à λ_i est simplement la dérivée partielle $\frac{\partial A}{\partial \lambda_i}$. La question correspondant au calcul de sensibilité est donc l'estimation du jacobien à l'aide des chemins disponibles, c'est-à-dire à partir des échantillons du processus dont on s'est servi pour l'estimation de A : estimer le jacobien en même temps que l'on estime A . Cette question occupe une part significative de la littérature la plus récente sur la méthode de Monte Carlo, notamment du fait d'efforts fournis par les informaticiens de la synthèse d'image, soit dans le but de comprendre une image ou l'inverser, c'est-à-dire trouver la géométrie, les propriétés surfaciques et les éclairages ayant conduit à l'image, ou encore coupler le rendu avec des algorithmes d'optimisation. Dans ces travaux l'une des plus grandes sources de difficulté réside dans le fait que toute modification de la géométrie modifie non seulement les probabilités de chaque chemin mais aussi l'espace des chemins lui-même (certains chemins ne sont plus possibles, d'autres apparaissent). Les recherches en cours sont loin de répondre à l'ensemble des exigences industrielles, mais elles commencent déjà à porter leurs fruits et certains calculs de sensibilités géométriques peuvent être déjà mis en œuvre industriellement, notamment dans le domaine du solaire concentré.

La seconde grande idée, encore embryonnaire mais qui a déjà fait ses preuves sur des configurations radiatives d'intérêt industriel, est le calcul symbolique. Son point de départ est assez simple : pourquoi introduit-on le concept de facteur de forme pour le transfert thermique radiatif entre surfaces ? Parce que les échanges entre surfaces sont des fonctions simples de la température et que la forme de ces fonctions fait intervenir le facteur de forme. Si A est l'échange entre deux surfaces dans l'exemple introductif de la section 2.1, alors avant tout calcul on sait que $A = F_{01} \sigma T_0^4$. Au lieu de calculer seulement par Monte Carlo l'échange radiatif entre deux surfaces, on peut calculer aussi le facteur de forme (stocker des 0 et des 1 en fonction de l'impact). Ensuite on peut recalculer l'échange entre les deux surfaces pour n'importe quelle autre valeur de la température T_0 sans avoir besoin de relancer le calcul Monte Carlo. La méthode de Monte Carlo a donc estimé la fonction

toute entière et non plus seulement une valeur de cette fonction pour une valeur de T_0 particulière. Bien sûr, dans ce cas particulier cela est possible simplement parce que la fonction est connue et qu'elle est linéaire. La littérature de Monte Carlo symbolique attaque cette question plus largement, notamment lorsque A a une forme fonctionnelle inconnue et est non-linéaire, ce qui est typiquement le cas lorsqu'on s'intéresse à des paramètres tels que le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion, le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase, etc. On est encore loin d'une approche maîtrisée et facile à mettre en œuvre, mais quand on parvient à une mise en œuvre effective, une observation que l'on peut faire et qui est essentielle est la suivante : toutes les caractéristiques de la méthode de Monte Carlo sont préservées lorsque l'on passe de l'estimation d'une valeur à l'estimation d'une fonction et notamment on dispose de façon systématique d'une incertitude, qui est elle-même fonction du paramètre et qui s'interprète statistiquement en exactement les mêmes termes que dans la pratique de Monte Carlo usuelle.

4.2 Approche déterministe : les éléments finis

La méthode des éléments finis a tout d'abord été conçue à partir des années 1970 par la communauté des mathématiciens appliqués pour la résolution d'équations aux dérivées partielles. Parmi eux, Olgierd Cecil Zienkiewicz peut être considéré comme l'un des fondateurs ; on y associe également les mathématiciens français renommés Jean C ea, Jean Leray, Philippe Ciarlet, Jacques-Louis Lions, Pierre-Arnaud Raviart, et d'autres encore. L'ouvrage de r ef erence, le fameux "Dautray et Lions", en a fait une synth ese rigoureuse avec une multitude d'applications pour la physique [26].

Dans ces ann ees 1970 et 1980, les applications vis ees tournaient essentiellement autour de la m ecanique des structures, et le probl eme au laplacien – gouvernant l' equation de la chaleur stationnaire –  etait bien souvent utilis e  a des fins de validation num erique de th eories math ematiques. La version la plus classique de la m ethodes des  el ements finis  etait bas ee sur les espaces de Sobolev et les fonctions associ ees de Lagrange.

Dans les ann ees 1980, les  el ements finis ont pu  etre  etendus  a d'autres probl emes de la physique. En  electromagn etisme, par exemple, c' est r eellement l'introduction des fonctions de N ed elec qui a permis la r esolution des  equations de Maxwell en trois dimensions d'espace [27]. De fa con un peu similaire, en m ecanique des fluides, l'introduction des espaces de Sobolev  a divergence nulle a permis la r esolution de probl emes de m ecanique des fluides en incompressible [28]. Bien s ur, d'autres  el ements d'ordre math ematique ont  ete n ecessaires au d eploiement des  el ements finis  a la m ecanique des fluides, notamment l'introduction des formulations de Galerkin discontinu et des  el ements finis dits stabilis es. En transferts radiatifs, les premiers travaux de mod elisation bas es sur les  el ements finis sont ceux de Reddy et Murty, en 1978 [29], mais la complexit e de r esolution de l' equation de transfert radiatif a limit e l' etude  a des cas  a une dimension d'espace. Il a fallu v eritablement attendre ce XXI e si ecle pour que les  el ements finis puissent  etre appliqu es en transfert radiatif  a des g eom etries bi-dimensionnelles puis tri-dimensionnelles [30, 31, 32].

Globalement, la m ethodes des  el ements finis permet de ne travailler qu'avec des produits scalaires et donc, d'un point de vue pratique, seules des int egrales sont  a calculer. Les approximations ne portent pas sur les op erateurs diff erentiels – ce qui est le cas en diff erences finies par exemple – mais sur l'espace fonctionnel dans lequel la fonction inconnue est recherch ee.

Dans le cas de probl emes au laplacien, l'espace fonctionnel dans lequel est cherch ee la solution est celui de Sobolev. Cet espace ne consid ere rien d'autre que les fonctions de carr e int egrable ayant les d eriv ees spatiales  egalement de carr e int egrable dans \mathcal{D} . Cet espace de Sobolev, souvent not e $W^1(\mathcal{D})$, est d efini ainsi :

$$W^1(\mathcal{D}) := \{u(\mathbf{x}) \in L^2(\mathcal{D}) ; \|\mathbf{grad}_x u\| \in L^2(\mathcal{D})\} \text{ avec } L^2(\mathcal{D}) := \left\{ \int_{\mathcal{D}} u^2(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} < \infty \right\}. \quad (125)$$

Les op erateurs mis en jeu dans l' equation de transfert radiatif sont bien entendu diff erents : l'op erateur laplacien est inexistant ; il y a un op erateur d'advection pour le transport, un autre de r eaction pour l'extinction, et encore un autre de type int egral pour le renforcement par diffusion. De plus, la luminance $L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ est fonction  a la fois de l'espace \mathbf{x} et de la direction $\boldsymbol{\omega}$. L'op erateur d'advection nous donne l'espace naturel dans lequel la solution est recherch ee :

$$W^1(\mathcal{D} \times \mathcal{S}^2) := \{L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in L^2(\mathcal{D} \times \mathcal{S}^2) ; \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in L^2(\mathcal{D} \times \mathcal{S}^2)\}. \quad (126)$$

Remarque Attention  a ne pas confondre la luminance $L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ avec l'espace $L^2(\cdot)$ des fonctions de carr e int egrable, dit de Lebesgue.

Un compte-rendu tr es d etaill e sur les propri etes math ematiques de l' equation de transfert radiatif est donn e dans le fameux Dautray et Lions [17],  a partir de la formulation dite faible de l' equation de transfert radiatif. En supposant que toutes les propri etes physiques sont born ees, la formulation variationnelle consiste  a chercher $L_\nu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in W^1(\mathcal{D} \times \mathcal{S}^2)$ tel

que pour toute fonction (la fameuse fonction test) $\varphi \in W^1(\mathcal{D} \times \mathcal{S}^2)$, l'équation suivante soit satisfaite :

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}} \int_{\mathcal{S}^2} \left(-\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{grad}_{\mathbf{x}} \varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) + \kappa_{e\nu} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \right. \\ & \quad \left. - \kappa_{d\nu} \int_{\mathcal{S}^2} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega} | \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \right) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\omega} + \int_{\partial\mathcal{D}^+} \int_{\mathcal{S}^2} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\omega} \\ & = - \int_{\partial\mathcal{D}^-} \int_{\mathcal{S}^2} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \tilde{L}_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\omega} + \int_{\mathcal{D}} \int_{\mathcal{S}^2} \kappa_{a\nu} L_{\nu}^0(T(\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\omega}. \quad (127) \end{aligned}$$

Remarque Les intégrales situées à gauche du signe égalité portent sur l'inconnue, en l'occurrence la luminance, tandis que les termes à droite sont considérés comme des données. D'un point de vue mathématique, les termes à gauche constituent la forme dite bilinéaire, tandis que les termes à droite constituent la forme dite linéaire. Après que l'espace fonctionnel soit approché, les termes à gauche permettent de construire la matrice dite de rigidité, tandis que les termes à droite permettent de construire le vecteur second membre. La résolution du système linéaire constitué de cette matrice et de ce vecteur permet d'accéder à la solution discrète du problème radiatif.

Remarque La frontière géométrique $\partial\mathcal{D}$ a été partitionnée pour distinguer les directions entrantes et sortantes :

$$\partial\mathcal{D}^- := \{(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in \partial\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} < 0\}; \quad \partial\mathcal{D}^+ := \{(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in \partial\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} > 0\}$$

La luminance sortante est inconnue; elle apparaît donc à gauche du signe égalité de la forme variationnelle (127). La luminance entrante est quant à elle connue puisqu'elle est issue d'un calcul en paroi (émission, réflexion, etc.); elle apparaît donc à droite du signe égalité de la forme variationnelle (127).

Exemple Une luminance incidente – provenant de l'extérieur du domaine d'étude – est indépendante de la solution. La condition à la limite sur $\partial\mathcal{D}^-$ s'écrit :

$$\tilde{L}_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \quad \forall (\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in \partial\mathcal{D}^- \quad (128)$$

Exemple Pour une réflexion diffuse, la luminance ré-entrante s'exprime en intégrant les contributions de toute la luminance sortante :

$$\tilde{L}_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_{\boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} > 0} L_{\nu}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') \rho_{\nu}(\boldsymbol{\omega} | \boldsymbol{\omega}'; \mathbf{x}) (\boldsymbol{\omega}' \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}}) d\boldsymbol{\omega}' \quad \forall (\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \in \partial\mathcal{D}^- \quad (129)$$

Pour la formulation faible (127), le théorème suivant s'applique. Ce théorème est important car il nous assure que nous aurons bien une solution à notre problème.

Théorème Si $\kappa_{a\nu}$ et $\kappa_{d\nu}$ sont non négatifs (presque) partout et si, de plus, le domaine \mathcal{D} est borné et convexe, et si l'on impose une condition d'entrée de type (128), alors le problème de transfert radiatif est bien posé, et le problème faible (127) admet une unique solution.

Remarque Même si la question du caractère bien posé du problème radiatif (1) est résolue d'un point de vue théorique par la démonstration mathématique de ce théorème [17], les conditions de régularité de la solution sont bien moins satisfaisantes.

La formulation faible (127) fait intervenir des intégrales à la fois en espace et en angulaire. Il est possible, du moins théoriquement, de travailler avec des éléments finis couplant ces deux espaces, mais la complexité algorithmique fait que, d'un point de vue pratique, la formulation faible est approchée selon deux étapes successives, d'une part en espace, et d'autre part en angulaire, l'ordre d'approximation n'étant pas particulièrement important. Dans ce qui suit, nous nous attacherons à approcher l'équation de transfert radiatif d'abord en angulaire, afin de bien mettre en évidence que la formulation qui en résulte est tout-à-fait similaire à celle issue de la méthode des ordonnées discrètes. Ce développement est intégré dans la section 4.2.1. Par la suite, différents éléments finis d'espace seront abordés, à travers la formulation de Galerkin continue, cf. section 4.2.2, puis discontinue, cf. section 4.2.3. La méthode des éléments finis stabilisés est ensuite rapidement présentée, cf. section 4.2.4, de même que les éléments finis dits vectoriels, cf. section 4.2.5. On aborde ensuite rapidement la question des solveurs, cf. section 4.2.6, et enfin, l'apport des bibliothèques mathématiques est évoqué, cf. section 4.2.7.

4.2.1 Éléments finis angulaires

L'espace fonctionnel pour la mise en œuvre des éléments finis angulaires peut être choisi de telle sorte que l'inconnue (la luminance) soit simplement de carré intégrable sur la sphère unité :

$$V^\omega = \{v(\omega) \in L^2(\mathcal{S}^2)\}. \quad (130)$$

La sphère unité \mathcal{S}^2 est maillée de telle manière que son approximation, notons-la \mathcal{S}_h^2 , soit l'union des éléments \mathcal{T}_j^ω , $j \in \llbracket 1; N_d \rrbracket$. L'espace fonctionnel approché $V_h^\omega \subset V^\omega$ est mis en place sur cette sphère discrète, en vue de la résolution numérique de l'équation de transfert radiatif semi-discrète, dans sa version faible. Pour cela, l'équation de transfert radiatif est multipliée par une fonction test, notons-la $\Psi(\omega) \in V_h^\omega$, puis intégrée sur l'espace angulaire \mathcal{S}_h^2 ⁴. Ainsi, le problème radiatif consiste à chercher $L_\nu(\mathbf{x}, \omega) \in V^\omega$ tel que, $\forall \Psi(\omega) \in V^\omega$:

$$\int_{\mathcal{S}^2} \left[\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega) + \kappa_{e\nu} L_\nu(\mathbf{x}, \omega) - \kappa_{d\nu} \int_{\mathcal{S}^2} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega') d\omega' - \kappa_{a\nu} L_\nu^0(T(\mathbf{x})) \right] \Psi(\omega) d\omega = 0. \quad (131)$$

Par la suite, définissons $\{\varphi_i(\omega)\}_{i=1}^{N_d}$ une base de V^ω telle que toute fonction $u(\omega) \in V^\omega$ puisse être approchée par la somme discrète :

$$u(\omega) = \sum_{i=1}^{N_d} \varphi_i(\omega) u(\omega_i). \quad (132)$$

Plutôt que d'exprimer la formulation faible $\forall \Psi(\omega)$, celle-ci est exprimée pour chaque fonction test $\varphi_j(\omega)$ constituant la base. Exprimons un à un chacun des termes de l'équation de transfert radiatif :

— terme de transport :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}^2} \omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega) \varphi_j(\omega) d\omega &= \int_{\mathcal{S}^2} \omega \cdot \sum_i \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) d\omega \\ &= \sum_i \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) \omega d\omega \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) \\ &= \sum_i \mathbf{a}(\varphi_i, \varphi_j) \cdot \mathbf{grad}_x L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) \\ &= \sum_{\alpha=\{x,y,z\}} \sum_i a^\alpha(\varphi_i, \varphi_j) \partial_\alpha L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i); \end{aligned} \quad (133)$$

— terme d'extinction :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}^2} \kappa_{e\nu} L_\nu(\mathbf{x}, \omega) \varphi_j(\omega) d\omega &= \kappa_{e\nu} \int_{\mathcal{S}^2} \sum_i L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) d\omega \\ &= \kappa_{e\nu} \sum_i \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) d\omega L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) \\ &= \kappa_{e\nu} \sum_i b(\varphi_i, \varphi_j) L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i); \end{aligned} \quad (134)$$

— terme intégral de diffusion :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}^2} \kappa_{d\nu} \int_{\mathcal{S}^2} L_\nu(\mathbf{x}, \omega') p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega') d\omega' \varphi_j(\omega) d\omega &= \int_{\mathcal{S}^2} \kappa_{d\nu} \int_{\mathcal{S}^2} \sum_i L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega_i) \varphi_i(\omega') d\omega' \varphi_j(\omega) d\omega \\ &= \kappa_{d\nu} \int_{\mathcal{S}^2} \sum_i L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega_i) \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega') d\omega' \varphi_j(\omega) d\omega \\ &= \kappa_{d\nu} \sum_i L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i) \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega) d\omega \int_{\mathcal{S}^2} p_{\Omega, \nu}^d(\omega|\omega_i) \varphi_j(\omega) d\omega \\ &= \kappa_{d\nu} \sum_i c(\varphi_i, \varphi_j) L_\nu(\mathbf{x}, \omega_i); \end{aligned} \quad (135)$$

4. À partir d'ici, les indices h sont omis pour des raisons de lisibilité. Ceci dit, les objets \mathcal{S}^2 (resp. V^ω) doivent être compris comme étant \mathcal{S}_h^2 (resp. V_h^ω).

— terme source d'émission :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}^2} \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \varphi_j(\omega) d\omega &= \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_j(\omega) d\omega \\ &= \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \ell(\varphi_j). \end{aligned} \quad (136)$$

La prise en compte de tous ces termes donne la version discrétisée, en angulaire, de l'équation de transfert radiatif. Le problème radiatif faible – l'aspect angulaire seul ayant été traité pour l'instant – consiste ainsi à chercher $L(\mathbf{x}, \omega_i)$, $i \in \llbracket 1; N_d \rrbracket$ tel que, $\forall j \in \llbracket 1; N_d \rrbracket$:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=\{x,y,z\}} \sum_i a^\alpha(\varphi_i, \varphi_j) \partial_\alpha L_v(\mathbf{x}, \omega_i) + \kappa_{ev} \sum_i b(\varphi_i, \varphi_j) L_v(\mathbf{x}, \omega_i) \\ = \kappa_{dv} \sum_i c(\varphi_i, \varphi_j) L_v(\mathbf{x}, \omega_i) + \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \ell(\varphi_j). \end{aligned} \quad (137)$$

Nous avons donc N_d équations linéaires et N_d inconnues. À ce stade, les inconnues sont les luminances spatialement dépendantes se propageant selon les N_d directions discrètes ω_i . Les N_d relations linéaires écrites ci-dessus peuvent être mises sous forme matricielle. Pour cela, une matrice \mathcal{A}^α est définie pour chaque opérateur de transport $\omega_\alpha \partial_\alpha I$, pour $\alpha = \{x, y, z\}$, une matrice \mathcal{B} est définie pour l'opérateur d'extinction, une matrice \mathcal{C} est définie pour l'opérateur de diffusion, et un vecteur \mathcal{L} est utilisé pour exprimer le terme d'émission :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{i,j}^\alpha &= a^\alpha(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) \omega_\alpha d\omega; \\ \mathcal{B}_{i,j} &= \kappa_{ev} b(\varphi_i, \varphi_j) = \kappa_{ev} \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) d\omega; \\ \mathcal{C}_{i,j} &= \kappa_{dv} c(\varphi_i, \varphi_j) = \kappa_{dv} \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_i(\omega) d\omega \int_{\mathcal{S}^2} p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i) \varphi_j(\omega) d\omega; \\ \mathcal{L}_j &= \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \ell(\varphi_j) = \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \int_{\mathcal{S}^2} \varphi_j(\omega) d\omega. \end{aligned} \quad (138)$$

Le problème radiatif semi-discret consiste alors à chercher $\mathbf{L}_v(\mathbf{x}) = \{L_{vj}\}_{j=1}^{N_d}(\mathbf{x})$ qui satisfait :

$$\sum_{\alpha=\{x,y,z\}} [\mathcal{A}^\alpha \partial_\alpha \mathbf{L}_v] + \mathcal{B} \mathbf{L}_v - \mathcal{C} \mathbf{L}_v = \mathcal{L}. \quad (139)$$

Remarque Une formulation alternative peut être écrite en considérant $\text{diag}(\mathcal{A})$ comprenant les éléments diagonaux de \mathcal{A} , et $\overline{\mathcal{A}}$ comprenant les éléments non diagonaux de \mathcal{A} . (On a bien $\mathcal{A} = \text{diag}(\mathcal{A}) + \overline{\mathcal{A}}$.) On introduit de même $\text{diag}(\mathcal{B})$ et $\overline{\mathcal{B}}$. La forme matricielle (139) peut ainsi être réécrite en :

$$\sum_{\alpha=\{x,y,z\}} [\text{diag}(\mathcal{A}^\alpha) \partial_\alpha \mathbf{L}_v] + \text{diag}(\mathcal{B}) \mathbf{L}_v + \sum_{\alpha=\{x,y,z\}} [\overline{\mathcal{A}}^\alpha \partial_\alpha \mathbf{L}_v] + (\overline{\mathcal{B}} - \mathcal{C}) \mathbf{L}_v - \mathcal{L} = 0. \quad (140)$$

Considérons maintenant la sphère unité \mathcal{S}^2 comme l'union d'éléments disjoints \mathcal{T}_j , les éléments étant par exemple les polygones représentés dans les figures 11 et 12. Dans le cas le plus simple, celui présenté ici, l'espace éléments finis $\mathbb{P}_0 \subset V^\omega$ est utilisé. Cet espace considère l'ensemble des fonctions constantes par morceaux, c'est-à-dire sur chaque élément (chaque polygone). Dans ce cas, nous avons les propriétés suivantes.

Propriété — les fonctions test vérifient $\varphi_i(\omega \in \mathcal{T}_j) = \delta_{i,j}$, c'est-à-dire 1 si $j = i$ et 0 sinon ;
— l'intersection du support de $\varphi_i(\omega)$ et $\varphi_j(\omega)$ est nul dès que $i \neq j$.

Remarque Pour le développement suivant, la direction ω est supposée constante dans tout l'élément sphérique \mathcal{T}_j .

Remarque Les directions considérées $\omega_k = (x_k, y_k, z_k)^\top$, $k = 1, \dots, N_d$ sont choisies judicieusement comme étant les barycentres des \mathcal{T}_k :

$$x_k = \int_{\mathcal{T}_k} x d\omega ; y_k = \int_{\mathcal{T}_k} y d\omega ; z_k = \int_{\mathcal{T}_k} z d\omega. \quad (141)$$

Le choix d'éléments \mathbb{P}_0 donne ainsi, pour $i \neq j$:

$$\int_{S^2} \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) \omega_\alpha \, d\omega = 0 \quad ; \quad \int_{S^2} \varphi_i(\omega) \varphi_j(\omega) \, d\omega = 0, \quad (142)$$

ainsi :

$$\overline{\mathcal{A}^\alpha} = 0 \quad ; \quad \overline{\mathcal{B}} = 0. \quad (143)$$

Sinon, pour $i = j$, nous avons :

$$\int_{S^2} \varphi_j(\omega) \varphi_j(\omega) \omega_\alpha \, d\omega \approx (\omega_\alpha)_j \int_{\mathcal{T}_j} d\omega = (\omega_\alpha)_j |\mathcal{T}_j|, \quad (144)$$

qui est équivalent à :

$$\mathcal{A}_{j,j}^\alpha = |\mathcal{T}_j| (\omega_\alpha)_j \quad ; \quad \mathcal{B}_{j,j} = |\mathcal{T}_j|. \quad (145)$$

Quant au terme de diffusion, sa version semi-discrète est obtenue de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \int_{S^2} \varphi_i(\omega) \, d\omega \int_{S^2} p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i) \varphi_j(\omega) \, d\omega &= \int_{\mathcal{T}_i} \varphi_i(\omega) \, d\omega \int_{\mathcal{T}_j} p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i) \varphi_j(\omega) \, d\omega \\ &= |\mathcal{T}_i| \int_{\mathcal{T}_j} p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i) \, d\omega. \end{aligned} \quad (146)$$

Enfin, la forme linéaire est donnée par :

$$\int_{S^2} \varphi_j(\omega) \, d\omega = \int_{\mathcal{T}_j} d\omega = |\mathcal{T}_j|. \quad (147)$$

Écrivant ensemble toutes les contributions, nous avons :

$$|\mathcal{T}_j| \omega_j \cdot \mathbf{grad}_x L_{vj} + \kappa_{ev} |\mathcal{T}_j| L_{vj} - \kappa_{dv} \sum_i |\mathcal{T}_i| \int_{\mathcal{T}_j} p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i) \, d\omega L_{vj} - |\mathcal{T}_j| \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) = 0 \quad \forall j. \quad (148)$$

Remarque En considérant que la fonction de phase $p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i)$ varie peu dans l'élément \mathcal{T}_j , la version semi-discrète relative au terme de diffusion peut être légitimement approchée par :

$$\int_{S^2} \varphi_i(\omega) \, d\omega \int_{S^2} p_{\Omega,v}^d(\omega|\omega_i) \varphi_j(\omega) \, d\omega \approx |\mathcal{T}_i| p_{\Omega,v}^d(\omega_j|\omega_i) \int_{\mathcal{T}_j} d\omega = |\mathcal{T}_i| p_{\Omega,v}^d(\omega_i|\omega_j) |\mathcal{T}_j| \quad (149)$$

La mesure $|\mathcal{T}_j|$ étant en facteur de tous les termes de (148), cette relation peut être simplifiée ainsi :

$$\omega_j \cdot \mathbf{grad}_x L_{vj} + \kappa_{ev} L_{vj} - \kappa_{dv} \sum_i |\mathcal{T}_i| \phi(\omega_i, \omega_j) L_{vi} - \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) = 0 \quad \forall j. \quad (150)$$

Remarque L'approximation (149) associée à l'utilisation de l'espace fonctionnel \mathbb{P}_0 nous a permis d'écrire formellement la version semi-discrète de l'équation de transfert radiatif sous la forme (150). Notons que cette formulation est tout-à-fait similaire à celle obtenue précédemment par la méthode des ordonnées discrètes, à condition qu'une méthode de partitionnement de la sphère ait été utilisée, cf. section 3.2.2.

Remarque Même si la formulation est analogue à celle fournie par la méthode des ordonnées discrètes, l'intérêt d'utiliser les éléments finis angulaires est de pouvoir utiliser les bibliothèques mathématiques éléments finis ainsi que tous les outils qui s'y rapportent, notamment les mailleurs et remailleurs, pour utiliser par exemple les discrétisations angulaires ad hoc qui s'adaptent à la physique mise en jeu.

Remarque Le développement éléments finis angulaires développé ici pour arriver à la formulation en ordonnées discrètes (150) est issu de [33].

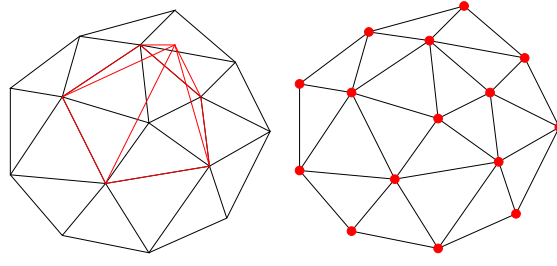


FIGURE 18 – Une fonction de base φ_i de V_h – Degrés de liberté de \mathbb{P}_1 .

4.2.2 Méthode de Galerkin

La méthode de Galerkin (sous-entendue continue) s'appuie sur des fonctions de base continues en espace, dans un maillage spatial \mathcal{M}_h . Les fonctions de base vérifient $\varphi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{i,j}$. La figure 18 montre un exemple de fonctions $\varphi_i(\mathbf{x})$ de base \mathbb{P}_1 pour l'un des degrés de liberté de \mathcal{M}_h . Cette figure présente également, schématiquement, les degrés de liberté en \mathbf{x}_i nécessaires à la création d'une base lagrangienne \mathbb{P}_1 , libre, génératrice et continue.

Définissons V_h l'espace des fonctions générées par cette base. Cet espace fonctionnel peut être défini par :

$$V_h = \{v_h \in C^0(\mathcal{D}) \text{ telle que } v_h|_{C_i} \in \mathbb{P}_k(C_i), i = 1, \dots, N_e\}. \quad (151)$$

Toute fonction $v_h \in V_h$ est générée par la base $\{\varphi\}_{i=1, \dots, N_{\text{dof}}}$. La fonction v_h peut alors s'écrire comme une somme pondérée des fonctions de base :

$$v_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{dof}}} \alpha_i \varphi_i(\mathbf{x}), \forall v_h \in V_h, \alpha_i \in \mathbb{R}. \quad (152)$$

Remarque N_{dof} signifie "nombre de degrés de liberté".

Par ailleurs, considérons, sous forme de résidu, l'une des équations linéaires de (106) :⁵

$$E(L_m) := \omega_m \cdot \mathbf{grad}_x L_m(\mathbf{x}) + \kappa_{ev} L_m(\mathbf{x}) - \kappa_{dv} \sum_{n=1}^{N_d} \xi_n L_n(\mathbf{x}) p_{\Omega, v}^d(\omega_m | \omega_n) - \kappa_{av} L^0(T(\mathbf{x})) = 0. \quad (153)$$

Pour construire la formulation faible, multiplions l'équation (153) par une fonction $v \in V_h$, puis intégrons sur le domaine d'étude \mathcal{D} :

$$\int_{\mathcal{D}} E(L_m) v \, d\mathbf{x} = 0, \forall v \in V_h. \quad (154)$$

L'équation (154) s'écrit sous sa forme faible condensée :

$$a_{m,m}(L_m, v) = - \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^{N_d} a_{m,n}(L_n, v) + l_m(v), \forall v \in V_h, \forall m = 1, \dots, N_d. \quad (155)$$

L'application du théorème de Green permet d'exhiber explicitement les conditions à appliquer aux bords ; les formes bilinéaires s'expriment ainsi :

$$a_{m,m}(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\mathcal{D}} \left(-\omega_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) + \kappa_{ev} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) - \kappa_{dv} \xi_m \varphi_i(\mathbf{x}) p_{\Omega, v}^d(\omega_m | \omega_m) \varphi_j(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathcal{D}^+} \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}; \quad (156)$$

$$a_{m,n \neq m}(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\mathcal{D}} \left(-\kappa_{dv} \xi_n \varphi_i(\mathbf{x}) p_{\Omega, v}^d(\omega_m | \omega_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x}. \quad (157)$$

La forme linéaire, quant à elle, s'exprime ainsi :

$$l_m(\varphi_i) = \int_{\mathcal{D}} \kappa_{av} L_v^0(T(\mathbf{x})) \varphi_i(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathcal{D}^-} \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \tilde{L}_m(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (158)$$

5. Pour des raisons de lisibilité, la dépendance spectrale des luminances est dorénavant ôtée.

Remarque *Le schéma de Galerkin est malheureusement instable pour le problème d'advection. Cette instabilité est d'autant plus importante que le terme d'advection est grand par rapport au terme d'extinction. Pour un milieu très diffusant et très absorbant, ce schéma peut être utilisé. En revanche, pour un milieu peu absorbant et peu diffusant, les instabilités inhérentes à ce schéma sont telles qu'il vaut mieux se pencher sur l'un des deux schémas suivants.*

4.2.3 Méthode de Galerkin discontinue

La méthode de Galerkin discontinue s'appuie sur des fonctions de base discontinues en espace sur \mathcal{M}_h . La base de fonctions discontinues et lagrangiennes $\{\varphi_i\}$ du maillage \mathcal{M}_h est alors le cumul de toutes les bases lagrangiennes de chacune des mailles. La figure 19 montre une des fonctions de base \mathbb{P}_1 discontinues du maillage ainsi que les degrés de liberté nécessaires à la construction de cette base. Notons que plusieurs degrés de liberté coexistent en un même point de l'espace.

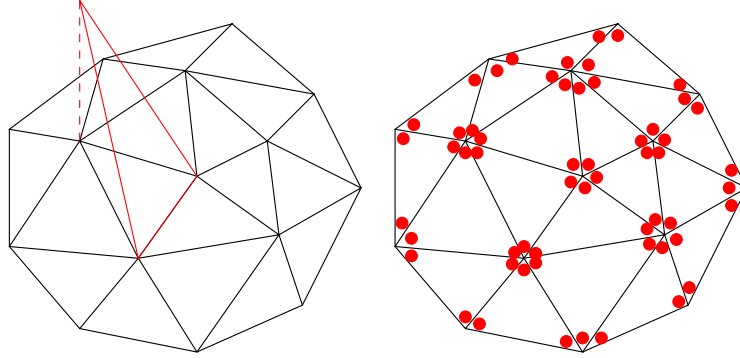


FIGURE 19 – Une fonction de base de V_h – Degrés de liberté de $\mathbb{P}_{1,dc}$.

La base lagrangienne discontinue $\{\varphi_1, \dots, \varphi_{N_{\text{dof}}}\}$ est construite pour être libre et génératrice. Définissons l'espace des fonctions générées par cette base :

$$V_h = \{v_h \in L_2(\mathcal{D}) \text{ telle que } v_h|_{C_i} \in \mathbb{P}_k(C_i), i = 1, \dots, N_e\}. \quad (159)$$

Remarque N_e signifie ici "nombre d'éléments".

Pour trouver une solution $L_m \in V_h$ de l'équation $E(L_m) = 0$, il faut aussi se ramener à une forme variationnelle, du même type que pour (155) associée aux formes (156)-(158). Pour cela, l'équation (106) est multipliée par une fonction test $v \in V_h$ avant d'être intégrée, non plus sur tout le domaine \mathcal{D} comme pour les méthodes de Galerkin, mais sur chaque élément C_i :

$$\int_{C_i} E(L_m)v \, dx = 0, \forall v \in V_h, \forall i = 1, \dots, N_e. \quad (160)$$

L'application du théorème de Green permet d'exhiber les conditions aux limites sur chaque maille. La somme de ces N_e formulations faibles locales permet d'écrire la formulation faible globale. Le système linéaire associé est alors construit, puis résolu pour la détermination de la solution $L_m \in V_h$.

Remarque *Les méthodes de Galerkin discontinues peuvent être vues comme des méthodes hybrides entre la méthode de Galerkin classique présentée plus haut et la méthode des volumes finis présentée dans la toute première partie de ce cours. En effet, la formulation variationnelle est le point de départ du développement mathématique ; nous avons donc bien affaire à une méthode de type éléments finis. De plus, le degré k des fonctions polynomiales peut – du moins en théorie – être choisi aussi élevé que souhaité. Par ailleurs, la propriété de conservativité est respectée, puisque les intégrales locales portent sur chaque élément.*

L'espace fonctionnel (159) comprend l'ensemble des fonctions polynomes sur chaque élément, sans qu'il y ait nécessairement continuité d'un élément à l'autre. L'intégration étant effectuée sur chaque élément, et le théorème de Green étant appliqué, un terme additionnel sur la frontière de l'élément permet l'échange de flux.

L'équation correspondant à la direction angulaire m du système semi-discret est donc multipliée par la fonction test v puis intégrée sur l'élément C_i :

$$\int_{C_i} (\omega_m \cdot \mathbf{grad}_x + \kappa_{e\nu}) L_m v \, dx - \sum_{j=1}^{N_d} \xi_j P_{\Omega, \nu}^d(\omega_m | \omega_j) \int_{C_i} \kappa_{d\nu} L_j v \, dx = \int_{C_i} \kappa_{a\nu} L^0(T(x)) v \, dx. \quad (161)$$

Le théorème de Green est ainsi appliqué sur le premier terme $\omega_m \cdot \mathbf{grad}_x L_m v$ en vue d'exhiber les flux inter-éléments :

$$\int_{C_i} \omega_m \cdot \mathbf{grad}_x L_m v \, dx = - \int_{C_i} L_m \omega_m \cdot \mathbf{grad}_x v \, dx + \int_{\partial C_i} L_m v \, \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \, dx. \quad (162)$$

Pour chaque direction particulière ω_m , la frontière de l'élément ∂C_i est décomposée en deux parties : $\partial C_i^{m+} = \{\mathbf{x} \in \partial C_i \mid \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \geq 0\}$ et $\partial C_i^{m-} = \{\mathbf{x} \in \partial C_i \mid \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} < 0\}$. La luminance sur ∂C_i^{m+} est la luminance de l'élément C_i tandis que la luminance sur ∂C_i^{m-} est choisie comme étant la luminance de l'élément se plaçant just en amont dans la direction ω_m , et notée \widehat{L}_m . Avec une telle partition :

$$\int_{\partial C_i} L_m v \, \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \, dx = \int_{\partial C_i^{m+}} L_m v \, \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \, dx + \int_{\partial C_i^{m-}} \widehat{L}_m v \, \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \, dx. \quad (163)$$

Les conditions dites essentielles de Dirichlet ainsi que les conditions de réflexion sont par la suite intégrées au développement ; une formulation grosso-modo similaire à celle obtenue par Galerkin peut être écrite formellement [34]. Les formes bilinéaires s'expriment ainsi :

$$\begin{aligned} a_{m,m}(\varphi_i, \varphi_j) &= \int_{\mathcal{D}} \left(-\omega_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) + \kappa_{e\nu} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \right. \\ &\quad \left. - \kappa_{d\nu} \xi_m \varphi_i(\mathbf{x}) p_{\Omega,\nu}^d(\omega_m | \omega_m) \varphi_j(\mathbf{x}) \right) dx \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N_e} \left[\int_{\partial C_k^{m+} \setminus \partial \mathcal{D}} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \, \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \, dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{\partial C_k^{m-} \setminus \partial \mathcal{D}} \widehat{\varphi}_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \, \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \, dx \right] \\ &\quad + \int_{\partial \mathcal{D}^+} \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \, dx ; \end{aligned} \quad (164)$$

$$a_{m,n \neq m}(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\mathcal{D}} \left(-\kappa_{d\nu} \xi_n \varphi_i(\mathbf{x}) p_{\Omega,\nu}^d(\omega_m | \omega_n) \varphi_j(\mathbf{x}) \right) dx. \quad (165)$$

La forme linéaire, quant à elle, s'exprime ainsi :

$$l_m(\varphi_i) = \int_{\mathcal{D}} \kappa_{a\nu} L^0(T(\mathbf{x})) \varphi_i(\mathbf{x}) \, dx + \int_{\partial \mathcal{D}^-} \omega_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \widehat{L}_m(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) \, dx. \quad (166)$$

4.2.4 Éléments finis stabilisés

Les éléments finis stabilisés basés sur le schéma SUPG (pour Streamline-Upwind Petrov–Galerkin) permettent de limiter les instabilités dues à la nature advective de l'équation de transfert radiatif, en ajoutant une diffusion artificielle [35]. Les éléments finis stabilisés se basent sur une fonction test du type $f_m(v) = v + \gamma \omega_m \cdot \mathbf{grad}_x v$ (pour l'équation semi-discrète m), le terme $\gamma \omega_m \cdot \mathbf{grad}_x v$ correspondant à la diffusion artificielle, avec γ une fonction scalaire devant être choisie habilement [36]. L'espace fonctionnel pour l'équation m s'écrit :

$$V^m = \{v \in L^2(\mathcal{D}); \omega_m \cdot \mathbf{grad}_x v \in L^2(\mathcal{D})\}. \quad (167)$$

Pour construire la formulation faible, multiplions l'équation (153) par la fonction linéaire $f_m(v) \in V^m$, puis intégrons sur le domaine d'étude \mathcal{D} :

$$\int_{\mathcal{D}} E(L_m) f_m(v) \, dx = 0, \quad \forall v \in V_h. \quad (168)$$

Le théorème de Green est appliqué sur le terme advectif, c'est-à-dire sur $\omega_m \cdot \mathbf{grad}_x L_m v$, en vue d'exhiber les conditions

aux limites. Après quelques développements, les différents termes de la formulation variationnelle sont donnés par :

$$\begin{aligned}
a_{m,m}(\varphi_i, \varphi_j) &= - \int_{\mathcal{D}} \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathcal{D}_m^+} \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
&+ \int_{\mathcal{D}} \gamma \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_i(\mathbf{x}) \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
&+ \int_{\mathcal{D}} \kappa_{ev} \varphi_i(\mathbf{x}) (\varphi_j(\mathbf{x}) + \gamma \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x} \\
&- \int_{\mathcal{D}} \xi_m p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}_m | \boldsymbol{\omega}_m) \kappa_{dv} \varphi_i(\mathbf{x}) (\varphi_j(\mathbf{x}) + \gamma \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x} ;
\end{aligned} \tag{169}$$

$$a_{m,n \neq m}(\varphi_i, \varphi_j) = - \int_{\mathcal{D}} \xi_n p_{\Omega, \nu}^d(\boldsymbol{\omega}_m | \boldsymbol{\omega}_n) \kappa_{dv} \varphi_i(\mathbf{x}) (\varphi_j(\mathbf{x}) + \gamma \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_j(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x} ; \tag{170}$$

$$l_m(\varphi_i) = - \int_{\partial \mathcal{D}^-} \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{n}_{\text{ext}} \varphi_i(\mathbf{x}) \tilde{L}_m(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\mathcal{D}} \kappa_{av} L^0(T(\mathbf{x})) (\varphi_i(\mathbf{x}) + \gamma \boldsymbol{\omega}_m \cdot \mathbf{grad}_x \varphi_i(\mathbf{x})) \, d\mathbf{x}. \tag{171}$$

Remarque Des études de convergence ont permis de comparer le schéma SUPG avec l'approche Galerkin discontinue. Les études comparatives entre ces deux types d'éléments finis ont porté sur chacun des opérateurs présents dans l'équation de transfert radiatif : advection, diffusion, et réflexion, de façon quantitative, à partir de quantifications d'erreurs et d'études de convergence. À titre d'exemple, les résultats de la figure 20 montrent que les éléments finis stabilisés peuvent être concurrentiels avec les méthodes de Galerkin discontinues, surtout si l'on prend aussi en compte le nombre de degrés de liberté associés. La référence [34] peut être consultée pour davantage de précisions sur ce point.

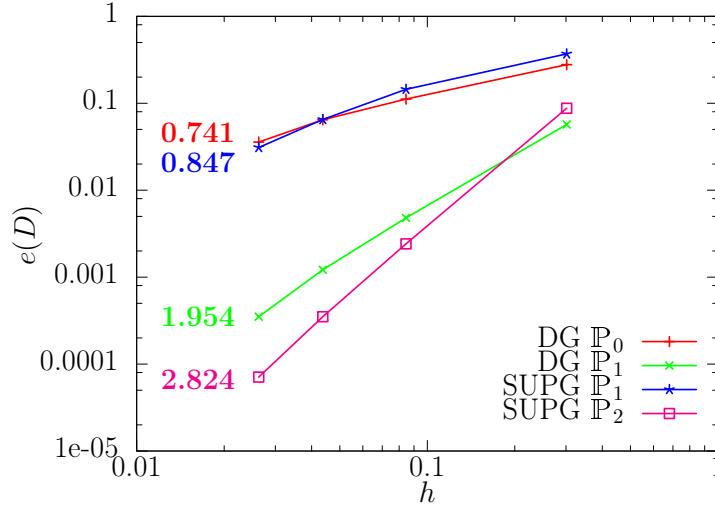


FIGURE 20 – Convergence en norme $L_2(\mathcal{D})$ d'un résultat de densité radiative en fonction de la taille du maillage pour les schémas éléments finis suivants : Galerkin discontinu et schéma SUPG.

4.2.5 Éléments finis vectoriels

Quel que soit le schéma éléments finis sur lequel est basée l'approximation (Galerkin continu, Galerkin discontinu ou éléments finis stabilisés), la forme faible s'écrit formellement – nous l'avons déjà vu – sous sa forme condensée :

$$a_{m,m}(L_m, v) = - \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^{N_d} a_{m,n}(L_n, v) + l_m(v), \quad \forall v \in V_h, \quad \forall m = 1, \dots, N_d \tag{172}$$

Cette forme condensée est écrite pour la luminance L_m , c'est-à-dire la luminance se propageant selon la direction $\boldsymbol{\omega}_m$. La forme bilinéaire se trouvant à gauche du signe égalité est relative (entre autres) au terme de transport selon la direction $\boldsymbol{\omega}_m$ et au terme d'extinction. La forme bilinéaire à droite du signe égalité est quant à elle relative au terme de renforcement par diffusion contenant toutes les contributions des incidences $\boldsymbol{\omega}_{n \neq m}$.

Se basant sur (172), l'algorithme naturel de résolution consiste à résoudre le problème direction par direction : les luminances se propageant selon $\boldsymbol{\omega}_{n \neq m}$ étant connues, la luminance se propageant selon $\boldsymbol{\omega}_m$ est calculée. Une boucle itérative permet de balayer toutes les directions successivement, et ce, plusieurs fois jusqu'à stabilisation. Cette méthode de résolution est appelée "méthode de la source itérée".

Remarque Cette méthode de la source itérée est tout-à-fait similaire à la méthode itérative de Gauss–Seidel dédiée à la résolution de systèmes linéaires.

La forme (172) peut être réécrite de telle sorte que toutes les inconnues – c’est-à-dire les luminances se propageant selon toutes les directions – soient placées à gauche du signe égalité. Ainsi, un unique système matriciel contient l’ensemble de toutes les inconnues, c’est-à-dire les luminances semi-discrètes $L_m(\mathbf{x})$, $\forall m = 1, \dots, N_d$. La résolution de ce – grand – système linéaire donne, en une seule fois, la solution discrète. La matrice associée à ce système linéaire est constituée de $N_d \times N_d$ matrices. La figure 21 présente, sur sa partie gauche, schématiquement, une telle structure par blocs. Chaque bloc de lignes est relatif à une luminance discrète. Si N_{dof} est le nombre d’inconnues (en espace) pour une direction donnée, c’est-à-dire $N_{\text{dof}} = \dim V_h$, alors le nombre total d’inconnues est $N_{\text{dof}} \times N_d$.

En fait, même si cette matrice est globalement pleine, chacun des blocs qui la composent est creux, les fonctions éléments finis étant, par nature, compactes. La matrice est donc presque pleine dans le sens où la largeur de bande est égale à la taille de la matrice, et il n’est donc pas aisé d’utiliser des outils classiques de décomposition de domaine, en vue de calcul parallèle (voir tout de même [22] pour des solutions apportées).

Cette structure par blocs n’étant pas propice à l’utilisation de méthodes de décomposition de domaine (méthode utilisée dans la communauté éléments finis pour du calcul parallèle), une alternative est ici proposée. Cette alternative consiste à considérer un unique vecteur inconnu contenant toutes les intensités radiatives, c’est-à-dire $\mathbf{L}(\mathbf{x}) = \{L_j\}_{j=1}^{N_d}(\mathbf{x})$. La fonction test est également vectorielle et :

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_{N_d} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{N_d} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N_d} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Theta} = \kappa_{d\nu} \begin{pmatrix} \xi_1 \phi_{1,1} & \xi_2 \phi_{1,2} & \cdots & \xi_{N_d} \phi_{1,N_d} \\ \xi_1 \phi_{2,1} & \xi_2 \phi_{2,2} & \cdots & \xi_{N_d} \phi_{2,N_d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \xi_1 \phi_{N_d,1} & \xi_2 \phi_{N_d,2} & \cdots & \xi_{N_d} \phi_{N_d,N_d} \end{pmatrix}, \quad (173)$$

où $\phi_{i,j}$ désigne la fonction de phase $p_{\Omega_i, \nu}^d(\omega_i | \omega_j)$. Notons que les v_i désignent ici les fonctions tests. Avec ces notations, l’équation de transfert radiatif semi-discrète peut être réécrite sous forme vectorielle :

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{grad}_x \mathbf{L} + \kappa_{e\nu} \mathbf{L} - \boldsymbol{\Theta} \mathbf{L} = \kappa_{a\nu} L^0(T(\mathbf{x})) \mathbf{1}. \quad (174)$$

La fonction test associée s’écrit, pour le schéma SUPG, $\mathbf{F}(\mathbf{V}) = \mathbf{V} + \gamma \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{grad}_x \mathbf{V}$, avec la fonction de stabilisation $\gamma(\mathbf{x}) : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^+$ judicieusement choisie. Le problème variationnel devient :

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{grad}_x \mathbf{L} + \kappa_{e\nu} \mathbf{L})^\top (\mathbf{V} + \gamma \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{grad}_x \mathbf{V}) \, dx - \int_{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\Theta} \mathbf{L})^\top (\mathbf{V} + \gamma \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{grad}_x \mathbf{V}) \, dx \\ & = \int_{\mathcal{D}} (\kappa_{a\nu} L^0(T(\mathbf{x})) \mathbf{1})^\top (\mathbf{V} + \gamma \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{grad}_x \mathbf{V}) \, dx. \end{aligned} \quad (175)$$

La matrice qui en résulte est donnée, de façon schématique, dans la figure 21 à droite : une matrice creuse est obtenue, mais avec des composantes sous forme de blocs pleins. Une telle structure est conforme avec les méthodes usuelles de partitionnement de domaine, de telle sorte que la résolution numérique peut se faire en parallèle.

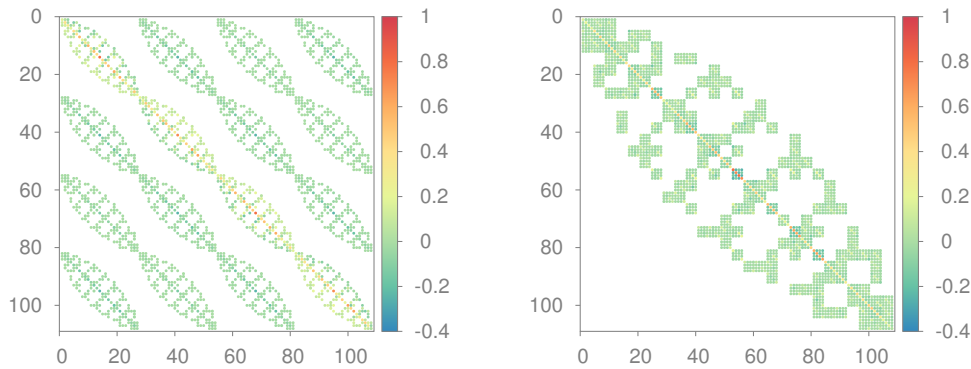


FIGURE 21 – Schémas présentant les structures de matrice associées à la discrétisation de l’équation de transfert radiatif, à gauche pour des éléments finis ordinaires, à droite pour les éléments finis vectoriels.

4.2.6 Solveurs itératifs

Le système linéaire issu des discrétisations spatiale et angulaire de l'équation de transfert radiatif est de grande taille ; les solveurs directs ne sont pas utilisables en pratique, et des solveurs itératifs doivent être mis en place. Parmi les solveurs itératifs, ceux basés sur les sous-espaces de Krylov sont, de loin, les plus performants. Le système linéaire n'étant pas symétrique à cause du terme d'advection, les solveurs BiCGSTAB [37] et GMRES [38] sont recommandés – les méthodes de type gradient conjugué étant inopérantes. La mise en place de préconditionneurs permet d'accélérer significativement la convergence de la solution. De notre expérience, les préconditionneurs de Jacobi et de Jacobi par blocs permettent une accélération notable de la convergence ; la méthode BiCGSTAB, en plus, stabilise le plus souvent le processus de convergence. La figure 22 rend compte de cela, pour un cas où le milieu semi-transparent est absorbant et diffusant, et avec des conditions aux limites de type réflexion spéculaire.

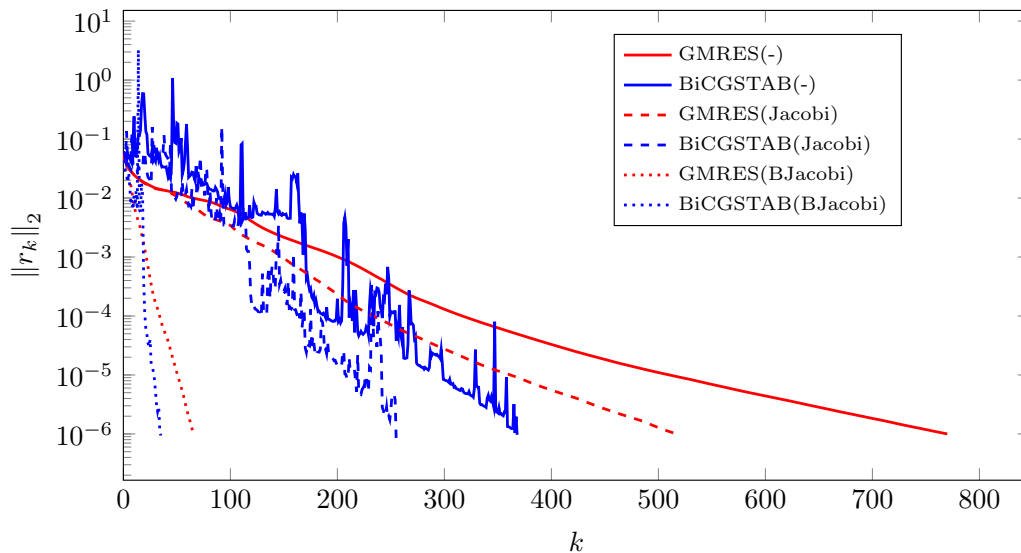


FIGURE 22 – Convergence pour les solveurs GMRES et BiCGSTAB, avec et sans préconditionneurs, pour le problème radiatif impliquant un milieu absorbant, diffusant et réfléchissant (l'axe des ordonnées présente la norme euclidienne du résidu). Ce test est issu de [39].

4.2.7 Bibliothèques mathématiques

À la fin du siècle dernier, de nombreuses bibliothèques mathématiques étaient déjà en accès libre. Ces bibliothèques, écrites le plus souvent en Fortran, et parfois aussi en C, permettaient à tout un chacun d'utiliser les outils mathématiques les plus à jour. Ces outils mis à disposition étaient, notamment, des solveurs de systèmes linéaires, des outils de minimisation, des outils permettant des études spectrales, de manipuler des matrices et vecteurs, etc. Parmi la panoplie de bibliothèques libres, la "Gnu Scientific Library", la fameuse GSL, en est un très bon exemple.

Aujourd'hui, il existe de très nombreuses bibliothèques dédiées notamment à la résolution d'équations aux dérivées partielles. Les éléments finis sont souvent utilisés car ils permettent de choisir aisément l'espace fonctionnel dans lequel l'inconnue est recherchée. Les outils associés : mailleurs, remaillleurs adaptatifs, calcul d'erreur a posteriori, outils de visualisation, etc. y sont généralement intégrés. Parmi les bibliothèques éléments finis, on peut citer, sans être exhaustif : FreeFEM, Feel+, libfem, Deal.II, etc. Pour toutes celles-ci, l'utilisateur doit – au moins – savoir écrire formellement la formulation variationnelle ; c'est la raison pour laquelle ce cours s'est attaché à les développer entièrement.

Les développeurs de ces bibliothèques dédiées à la résolution d'équations aux dérivées partielles s'attachent aujourd'hui, autant que possible, à ce que les calculs puissent être faits en parallèle, sans que cela soit compliqué outre mesure pour l'utilisateur. La compilation de ces bibliothèques est de plus en plus aisée, la résolution sur super-calculateur s'en trouve ainsi facilitée, les géométries étudiées deviennent de plus en plus réalistes : là où à la fin du XX^e siècle la résolution se faisait sur des carrés et des cubes, aujourd'hui, à l'aube de ce XXI^e siècle, les calculs radiatifs se font sur des géométries bien plus complexes : des milieux poreux, des cellules de Kelvin, etc. On peut imaginer que dans un avenir pas si lointain, les calculs puissent être faits sur des structures bien plus importantes encore.

Références

- [1] P. Boulet, D. Lacroix, and A. Collin. Notions de base en rayonnement thermique, 2022. Recueil de cours de l'école thématique MATTER du GDR TAMARYS.

- [2] S. Blanco, J. Dauchet, M. El Hafi, and R. Fournier. Physique du transfert radiatif en milieu semi-transparent, 2022. Recueil de cours de l'école thématique MATTER du GDR TAMARYS.
- [3] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Clarendon Press, 1950.
- [4] N. Metropolis and S. Ulam. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, 44 :335–341, 1949.
- [5] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb. *Monte Carlo Methods*. Fletcher & Son Ltd, 1964.
- [6] R. Siegel and J.R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*. McGraw-Hill, 1981.
- [7] J.H. Jeans. The Equations of Radiative Transfer of Energy. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 78 :28–36, 1917.
- [8] R.E. Marshak. Note on the Spherical Harmonic Method as Applied to the Milne Problem for a Sphere. *Physical Review*, 71 :443–446, 1947.
- [9] A.C. Ratzel and J.R. Howell. Two-Dimensional Radiation in Absorbing-Emitting-Scattering Media Using the P-N Approximation. *ASME Journal of Heat Transfer*, 105 :333–340, 1983.
- [10] B. Davison and J.B. Sykes. *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press, 1957.
- [11] D. Lemonnier, R. Fournier, and C. Caliot. Méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif, 2014. Recueil de cours de l'école thématique CNRS « Rayonnement Thermique en milieux semi-transparentes ».
- [12] Clarence E Lee. *The discrete Sn approximation to transport theory*, volume 2595. Los Alamos Scientific Laboratory of the University of California, 1962.
- [13] Bengt G Carlson. Transport theory : Discrete ordinates quadrature over the unit sphere. Technical report, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1970.
- [14] David Le Hardy. *Traitement des conditions aux limites spéculaires pour l'étude du transfert radiatif dans des matériaux à géométrie complexe*. PhD thesis, Nantes, 2017.
- [15] CP Thurgood, A Pollard, and HA Becker. The tn quadrature set for the discrete ordinates method. 1995.
- [16] Rainer Koch and Ralf Becker. Evaluation of quadrature schemes for the discrete ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84(4) :423–435, 2004.
- [17] Robert Dautray and Jacques-Louis Lions. *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology : volume 6 evolution problems*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [18] Erik Meinköhn, Guido Kanschat, Rolf Rannacher, and Rainer Wehrse. *Numerical methods for multidimensional radiative transfer*. Springer, 2007.
- [19] Kaye D Lathrop. Ray effects in discrete ordinates equations. *Nuclear Science and Engineering*, 32(3) :357–369, 1968.
- [20] Mohan Ammanath Ramankutty and Alfred L Crosbie. Modified discrete ordinates solution of radiative transfer in two-dimensional rectangular enclosures. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 57(1) :107–140, 1997.
- [21] GD Raithby. Evaluation of discretization errors in finite-volume radiant heat transfer predictions. *Numerical Heat Transfer : Part B : Fundamentals*, 36(3) :241–264, 1999.
- [22] MA Badri, Pierre Jolivet, Benoit Rousseau, and Yann Favennec. High performance computation of radiative transfer equation using the finite element method. *Journal of Computational Physics*, 360 :74–92, 2018.
- [23] M. Pharr, J. Wenzel, and G. Humphreys. *Physically Based Rendering : from Theory to Implementation*. Morgan Kaufmann Publishers, 2016.
- [24] Najda Villefranque, Richard Fournier, Fleur Couvreur, Stéphane Blanco, Céline Cornet, Vincent Eymet, Vincent Forest, and Jean-Marc Tregan. A path-tracing monte carlo library for 3-d radiative transfer in highly resolved cloudy atmospheres. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 11(8) :2449–2473, 2019.
- [25] Grégoire Allaire, Xavier Blanc, Bruno Despres, and François Golse. *Transport et diffusion*. Les éditions de l'École polytechnique, 2018.
- [26] Robert Dautray and Jacques-Louis Lions. Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques. *Collection du Commissariat à l'Energie Atomique. Serie Scientifique*, 1985.
- [27] Alain Bossavit. *Electromagnetisme, en vue de la modelisation*, volume 14. Springer Science & Business Media, 2004.
- [28] Olivier Pironneau and Olivier Pironneau. *Finite element methods for fluids*. Wiley Chichester, 1989.
- [29] JN Reddy and VD Murty. Finite-element solution of integral equations arising in radiative heat transfer and laminar boundary-layer theory. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 1(3) :389–401, 1978.
- [30] Sabine Richling, Erik Meinköhn, N Kryzhevoi, and Guido Kanschat. Radiative transfer with finite elements-i. basic method and tests. *Astronomy & Astrophysics*, 380(2) :776–788, 2001.

- [31] Hao Gao and Hongkai Zhao. A fast-forward solver of radiative transfer equation. *Transport Theory and Statistical Physics*, 38(3) :149–192, 2009.
- [32] Rafael O Castro and Juan Pablo Trelles. Spatial and angular finite element method for radiative transfer in participating media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 157 :81–105, 2015.
- [33] Yann Favennec, Tom Mathew, Mohammad A. Badri, Pierre Jolivet, Benoit Rousseau, Denis Lemonnier, and Pedro J. Coelho. Ad hoc angular discretization of the radiative transfer equation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 225 :301–318, 2019.
- [34] D Le Hardy, Y Favennec, and B Rousseau. Solution of the 2-d steady-state radiative transfer equation in participating media with specular reflections using supg and dg finite elements. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 179 :149–164, 2016.
- [35] Pavel B Bochev, Max D Gunzburger, and John N Shadid. Stability of the SUPG finite element method for transient advection–diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(23) :2301–2323, 2004.
- [36] Matias Avila, Ramon Codina, and Javier Principe. Spatial approximation of the radiation transport equation using a subgrid-scale finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(5) :425–438, 2011.
- [37] Henk A Van der Vorst. Bi-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*, 13(2) :631–644, 1992.
- [38] Youcef Saad and Martin H Schultz. GMRES : A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*, 7(3) :856–869, 1986.
- [39] Mohammad A. Badri, Pierre Jolivet, Benoit Rousseau, and Yann Favennec. Preconditioned Krylov subspace methods for solving radiative transfer problems with scattering and reflection. *Computers & Mathematics with Applications*, 77 :1453–1467, 2019.