

Rapport de stage de 4ème année : Modélisation du transfert radiatif en milieux nuageux, par méthode de Monte Carlo

Paola de Truchis

26 novembre 2024

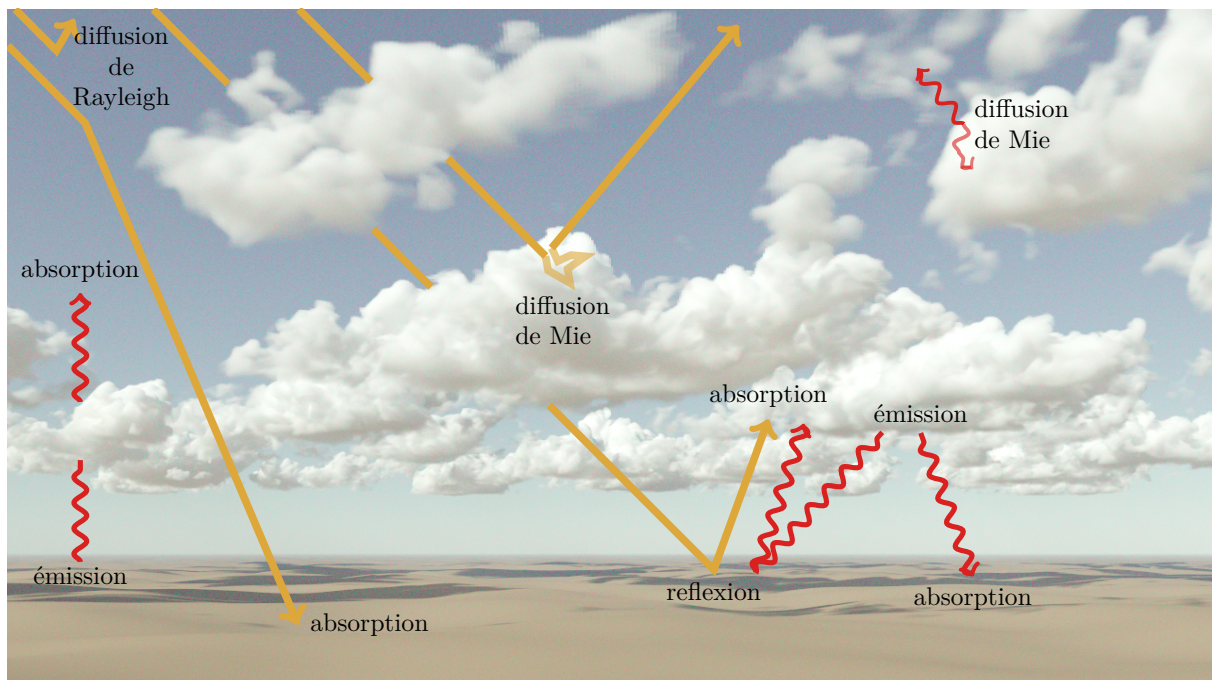


Table des matières

1	Introduction	3
2	Description succincte des laboratoires d'accueil	4
2.1	Centre National de Recherches Météorologiques	4
2.2	Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie	4
3	Inscription du stage dans les questions de recherche de Dephy et EDStar	5
3.1	Modélisation du rayonnement en milieux nuageux dans les modèles de climat	5
3.1.1	La modélisation physique et le collectif Dephy	5
3.1.2	Prise en compte des nuages dans les modèles de rayonnement	5
3.1.3	Approche déterministe pour modéliser le rayonnement en présence de nuages	6
3.1.4	Approche hybride pour modéliser le rayonnement en présence de nuages	6
3.2	Résolution par méthodes de Monte Carlo de systèmes couplés et non linéaires	8
3.2.1	Les méthodes de Monte Carlo pour la physique et le collectif EDStar	8
3.2.2	MCMET : un projet ANR à la jonction des communautés Dephy et EDStar	8
4	État de l'art	13
4.1	Formulation de l'équation cinétique avec collision nulle et ses applications	13
4.2	Olson et les milieux stochastiques markoviens	14
4.3	Propositions de couplage en sciences de l'atmosphère	14
4.4	Problématique : établir un modèle couplé complet en retravaillant les briques existantes dans les différentes communautés dans une philo Unix	15
5	Couplage de l'ETR et de l'échantillonnage d'un milieu Markovien	16
5.1	Caractérisation des estimateurs et du temps de calcul	16
5.1.1	Formule analytique pour un cas simple : collision nulle dans un slab homogène . . .	16
5.1.2	Construction et caractérisation des estimateurs pour un slab markovien sans diffusion	19
5.1.3	Construction et caractérisation des estimateurs pour un slab markovien avec diffusion	21
5.2	Etude du biais de discrétisation du milieu Markovien à statistique non homogène	23
5.2.1	Établir un lien entre milieux markoviens et le modèle d'overlap	24
5.2.2	Caractérisation du biais de discrétisation des milieux Markoviens	26
6	Ouverture et perspective	28
7	Conclusion personnelle	29



1 Introduction

Dans le cadre de mon cursus d'ingénieur en Mathématiques Appliquées à l'INSA de Toulouse, j'ai effectué mon stage de quatrième année entre le Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM), au sein de l'équipe TROPIC²S, et la Faculté de Paul Sabatier au sein du Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie (LAPLACE).

Ce stage fut encadré par Najda Villefranque, une chercheuse interdisciplinaire recrutée au CNRS en 2022, affectée au CNRM en tant que spécialiste du rayonnement et chercheuse partenaire du LAPLACE. Son travail se trouve à la confluence entre deux communautés scientifiques : Dephy, des physiciens de l'atmosphère et EDStar, des modélisateurs travaillant sur les méthodes de Monte Carlo.

Mon stage s'inscrit donc à la jonction entre ces deux communautés, dans le projet Méthode de Monte Carlo pour la Transition Énergétique (MCMET), porté par EDStar, qui a pour but d'étendre les méthodes de Monte Carlo à des cas où l'équation cinétique est couplée à un modèle de la fréquence de collision, ce qui a lieu dans diverses applications notamment pour modéliser le rayonnement en physique de l'atmosphère.

Le collectif Dephy travaille la modélisation des phénomènes physiques dans les modèles climatiques. Le rayonnement est au coeur de leur recherche puisque c'est la source principale d'énergie responsable de la dynamique atmosphérique. La modélisation du rayonnement est très liée à la modélisation des nuages puisque les nuages ont un effet très important sur le rayonnement et vont moduler le flux radiatif stocké par les océans, et donc le niveau de réchauffement climatique. L'objectif de ce stage est de revisiter la modélisation du rayonnement nuageux qui est classiquement utilisée dans les modèles de climat. Pour cela, on va travailler à proposer un modèle couplant équation du transfert radiatif et modèle statistique de la géométrie des nuages, en une seule formulation statistique que l'on pourra résoudre par Monte Carlo.

Dans le collectif EDStar qui travaille beaucoup sur les couplages de modèles physiques, le couplage entre équation du transfert et milieux stochastique est encore peu travaillé. Ce stage est donc l'opportunité d'établir le formalisme autour d'un nouveau genre de problème, ce qui est un lieu de recherche en soit. L'extension des méthodes de Monte Carlo à de nouveaux problèmes impossibles à résoudre auparavant passe par une recherche théorique, mathématique, physique, méthodologique et informatique. Dans ce stage j'ai donc travaillé sur ces différents aspects pour construire et caractériser un nouveau type de modèle couplé avec le formalisme d'EDStar pour répondre aux besoins de modélisation de la communauté Dephy.

2 Description succincte des laboratoires d'accueil

2.1 Centre National de Recherches Météorologiques

Le stage s'est déroulé en grande partie au Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM), un laboratoire de recherche sous la tutelle de Météo France et du CNRS (Unité Mixte de Recherche 3589) regroupant environ 300 chercheurs. Une partie de la recherche qui a lieu au CNRM répond aux besoins de Météo-France dont la mission est la protection des personnes et des biens. Pour cela, le CNRM porte une recherche de pointe en prévision météorologique sur de multiples échelles spatio-temporelles, en physique et dynamique de l'atmosphère et en climat.

Les chercheurs du CNRM sont divisés en six groupes thématiques : météorologie (GMAP), processus (GMME), climat (GMGEC), instrumentation (GMEI), neige (CEN) et observations satellites (CEMS). Le stage s'est déroulé dans le groupe GMME, dans l'équipe TROPIC²S qui travaille sur les processus atmosphériques dominants dans les tropiques : la convection et les nuages. Il s'agit à la fois de mieux comprendre et de mieux modéliser ces processus dans les modèles de prévision météorologique et de climat.

L'équipe TROPIC²S est très impliquée dans la coordination nationale des efforts pour la modélisation physique de l'atmosphère, au travers du groupe de recherche Dephy, un collectif réunissant environ cinquante chercheurs de onze laboratoires différents, avec une majorité de personnes venant soit du CNRM soit du Laboratoire de Météorologie Dynamique à Paris.

2.2 Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie

Une autre partie du stage s'est déroulée dans le laboratoire LAPLACE sous tutelle de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, de l'Université Paul Sabatier et du CNRS (Unité Mixte de Recherche 5213), regroupant environ 300 chercheurs. La recherche du LAPLACE vise à répondre aux préoccupations de la société sur la transition énergétique. Pour cela, le LAPLACE porte une recherche de pointe sur l'énergie (production, conversion, usage etc), à la fois sur la compréhension de la physique fondamentale jusqu'à la compréhension des systèmes complexes.

Au sein du LAPLACE l'équipe GREPHE a un axe de recherche sur l'ingénierie statistique de la complexité. Il s'agit de reformuler des problèmes déterministes sous un regard statistique, pour en enrichir l'analyse et permettre la simulation par méthodes de Monte Carlo. Une entreprise de trois ingénieurs chercheurs, Méso-Star, a été créée il y a dix ans et est hébergée dans le même couloir. Ils développent des outils informatiques et des logiciels pour résoudre des problèmes physiques par les méthodes de Monte Carlo avec une approche issue de l'informatique graphique pour reproduire les succès de la synthèse d'image mais dans le domaine énergétique.

L'équipe est très impliquée dans la coordination nationale de la recherche sur les méthodes de Monte Carlo pour la physique, au travers du groupe de recherche EDStar, un collectif réunissant environ cinquante chercheurs d'environ 20 laboratoires couvrant des domaines variés comme la thermique de systèmes complexes (habitat, ville, micro-électronique...), le transfert radiatif planétaire, l'énergie solaire (photovoltaïque, centrales solaires à concentration), ou le génie des procédés (photobioréacteurs, combustion de biomasse).

3 Inscription du stage dans les questions de recherche de Dephy et EDStar

3.1 Modélisation du rayonnement en milieux nuageux dans les modèles de climat

3.1.1 La modélisation physique et le collectif Dephy

Le collectif DePhy réunit des communautés d'étude des processus, d'observations et des modélisateurs autour d'un même objectif : le développement et l'amélioration du contenu physique des modèles utilisés pour l'étude du climat et les prévisions numériques du temps. Ce rapport se concentre sur la modélisation des phénomènes physiques au sein de la composante atmosphérique des modèles climatiques. On appelle "paramétrisation" ces bouts de modèles physiques. Pour mieux comprendre ce que cela implique, il est important de s'intéresser d'abord au fonctionnement général des modèles climatiques appelés Modèles de Circulation Générale (GCM).

Ces modèles servent à prédire le climat, c'est à dire les conditions météorologiques moyennes sur une région et une période données. Ces modèles intègrent les interactions entre les différentes composantes du système climatiques qui sont : l'atmosphère, l'océan, les surfaces continentales et les glaces, tout cela au cours du temps. Pour simuler la dynamique de l'atmosphère, les modèles doivent rendre compte de nombreux phénomènes agissant à différentes échelles. Pour cela les modélisateurs du climat propose un modèle séparé en deux grandes parties : le "coeur dynamique" et "la physique". La première consiste à résoudre les équations de la mécanique des fluides pour modéliser la circulation à l'échelle planétaire. La seconde étape modélise les processus physiques de plus petite échelle. Ces deux étapes sont résolues successivement à chaque pas de temps d'environ quinze minutes. La dynamique des fluides est résolue en 3D sur l'ensemble de l'atmosphère de façon déterministe. Pour cela, l'atmosphère terrestre est maillée en colonnes d'environ cent kilomètres de coté, divisées en couches horizontales d'environ cent mètres à un kilomètre d'épaisseur. La résolution des équations de la dynamique calcule les nouvelles valeurs des variables d'état (température, pression, vents et humidité moyennes dans chaque maille) après un pas de temps. Dans la seconde étape, la résolution des équations de la physique est réalisée indépendamment dans chaque colonne. Pour que cette résolution soit rapide et puisse ainsi être effectuée dans chaque colonne et intégrée sur de grandes échelles de temps, les modélisateurs résument les impacts des phénomènes physiques sur les variables d'état moyennes, via une modélisation des transferts verticaux. Cela produit de courtes équations, brèves à résoudre numériquement. Cette étape, intitulée paramétrisation est au coeur des activités du collectif DePhy.

3.1.2 Prise en compte des nuages dans les modèles de rayonnement

Leur recherche se structure autour de trois axes principaux : la turbulence et les couplages avec la surface, le transport convectif et enfin les interactions nuages-rayonnement. Leur objectif est de travailler ces questions tout en intégrant les développements réalisés dans les modèles pour aboutir à la réduction des erreurs systématiques des modèles. Mon stage s'intègre dans ce collectif en se concentrant sur le développement de modèles de rayonnement en présence de nuages. L'interaction nuages-rayonnement est un phénomène clé pour la modélisation de la météo et du climat puisque le rayonnement est la source principale d'énergie du système et est donc responsable de la dynamique atmosphérique ainsi que de la formation, du développement et du cycle de vie des nuages qui réciproquement vont grandement influencer sur le flux radiatif et le taux de chauffage de l'atmosphère. Plus précisément, ce n'est pas juste la présence de nuages, mais aussi leurs propriétés physiques et géométriques qui vont moduler les flux radiatifs [1]. Les propriétés physiques sont par exemple la fraction de la maille contenant de l'eau nuageuse, la concentration en eau liquide et glacée, la taille des gouttelettes et des cristaux... Elles sont calculées par les paramétrisations "nuageuses" des modèles. Leur géométrie quant à elle est principalement caractérisée par trois grandeurs : la taille horizontale des nuages, l'hétérogénéité horizontale de l'eau nuageuse et l'empilement vertical des fractions nuageuses. L'empilement, caractérisé par l'overlap qui traduit du "recouvrement" nuageux, influe très fortement sur les flux radiatifs. En effet, dans une colonne donnée, la quantité moyenne de lumière arrivant au sol est beaucoup plus grande si les nuages sont parfaitement empilés les uns au dessus des autres, couvrant une petite partie de la surface, que s'ils sont étalés et couvrent une plus grande partie de la surface. Plus les nuages se recouvrent, plus la "couverture nuageuse" est faible et plus le flux est grand.

Il est connu dans la communauté atmosphérique que l'empilement vertical va dépendre du type de

nuage modélisé. On sait par exemple que les tours convectives des congestus et des cumulonimbus sont plutôt bien empilés sur la verticale, alors que les cirrus sont de fins nuages très étalés. On sait également que la position d’un nuage de basse altitude comme un cumulus n’influe pas sur la position d’un nuage de haute altitude comme un cirrus, on dit que leur recouvrement est “random” ou indépendant. Dans les modèles, cela se traduit par une fonction de corrélation verticale, qui est d’autant plus forte que l’on regarde des nuages proches. Autrement dit, deux nuages verticalement proches ont de grandes chances d’être superposés, car en réalité ce n’est qu’un seul et même nuage. En revanche deux nuages verticalement infiniment éloignés ou séparés par du ciel clair (de l’air sans eau nuageuse) sont considérés comme deux nuages différents et ne sont donc pas corrélés. Ce modèle s’appelle exponentiel random et a été proposé par Robin Hogan et Anthony Illingworth dans [9]. Dans les modèles cette fonction de corrélation sera discrétisée sur les couches des colonnes, et seule la corrélation entre les couches adjacentes sera prise en compte. Cela correspond à une hypothèse de milieu markovien par son absence de mémoire (cf Figure 1). Plus précisément ce sont des milieux markoviens à statistique non homogène car la fraction nuageuse varie en fonction de l’altitude. On va voir comment ces hypothèses d’overlap rentrent en compte dans les modèles de transfert radiatif utilisés dans les GCMs. Dans les GCMs, il y a deux écoles pour modéliser le transfert radiatif, l’une par une résolution entièrement déterministe et l’autre avec une résolution mélangeant un modèle statistique et un modèle déterministe.

3.1.3 Approche déterministe pour modéliser le rayonnement en présence de nuages

TripleCloud [19] et Spartacus [10, 18] sont deux modèles utilisés actuellement pour résoudre le rayonnement dans les GCMs, développés par Robin Hogan au Centre Européen de Prévisions Météorologiques. La résolution du rayonnement se fait entièrement de façon déterministe. C’est à dire que les hypothèses sur l’overlap sont intégrées dans une formulation en flux qui synthétise l’impact des nuages sur le rayonnement. A l’origine ces modèles en flux ont deux variables d’état à chaque interface entre les couches de la colonne : un flux montant et un flux descendant. Mais cela ne suffit pas en présence de nuages.

Le modèle TripleCloud modélise les nuages d’une couche avec trois valeurs de concentration en eau condensée différents (dont une région sans eau condensée qui correspond au ciel clair). Pour cela, il rajoute de nouvelles variables d’état : un flux montant pour chaque région et un flux descendant pour chaque région. Cette formulation en flux par région est assez complexe puisque les coefficients de transfert entre les couches diffèrent selon si le transfert se fait entre une région de ciel clair et une région nuageuse épaisse ou fine, ou entre deux régions nuageuses etc. Les hypothèses d’overlap sont utilisées pour déterminer le taux de recouvrement entre ces différentes régions et sont directement inclus dans le modèle en flux. L’une des limitations de ce modèle est qu’il ne prend pas en compte les effets 3D des nuages. Pour être plus clair, il ne prend en compte les transferts de rayonnements horizontaux au sein d’une couche donnée, qui sont pourtant importants. Pour pallier à ce problème, un nouveau modèle nommé Spartacus a été développé. Spartacus fonctionne presque comme TripleCloud, avec des termes sources et puites en plus pour synthétiser les effets des transferts horizontaux entre les trois régions d’une même couche.

Une autre des limitations de ces deux modèles est l’intrication des modèles de transfert radiatif et des hypothèses de géométrie des nuages. La formulation en flux a été modifiée pour synthétiser ce que nous avons compris de l’effet de l’overlap sur le transfert de rayonnement. Si l’on veut faire des hypothèses différentes sur la géométrie des nuages, c’est une modification très lourde puisqu’il faut changer la formulation en flux. On a donc un manque de flexibilité qui empêche de faire évoluer la modélisation de la géométrie des nuages.

3.1.4 Approche hybride pour modéliser le rayonnement en présence de nuages

L’alternative aux modèles déterministes est le modèle Monte Carlo avec Approximation des Colonnes Indépendantes (MCICA) qui a été développé au Canada et aux Etats-Unis par Robert Pincus et Howard Barker [16] et qui mélange méthodes statistiques et méthodes déterministes. Ce modèle est aussi assez utilisé dans les GCMs.

Rappelons que le GCM nous fournit deux variables qui sont la quantité d’eau condensée et la fraction nuageuse dans chaque couche de la colonne. Le modèle statistique de géométrie nuageuse fait exister une distribution statistique sous-jacente à ces grandeurs. Il définit des variables aléatoires sont des vecteurs (une variable aléatoire par couche) qui représentent la composition de chaque couche (C_k : présence de nuage ou non dans la couche k , Q_k : concentration d’eau nuageuse dans la couche) qui est maintenant homogène. Les variables fournies par le GCM sont alors interprétées comme l’espérance de ces variables aléatoires (la fraction nuageuse dans une couche donnée est l’espérance de C_k et la concentration moyenne

FIGURE 1

Description markovienne du modèle d'overlap

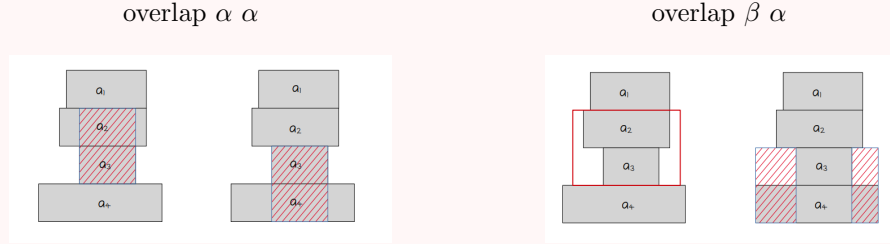
1. Milieu stochastique binaire. On considère que l'atmosphère est un milieu binaire, c'est à dire composé de deux matériaux α et β correspondant respectivement au nuage et au ciel clair. Chacun des deux matériaux est considéré comme homogène. On définit une variable aléatoire de Bernoulli valant 1 (respectivement 0), si le point observé est dans α respectivement β . Cette variable aléatoire est indicé par k qui représente le numéro de la couche. La probabilité d'être dans un nuage correspond à la fraction nuageuse a .

$$\mathbb{P}(C_k = 1) = a \quad \text{et} \quad \mathbb{P}(C_k = 0) = 1 - \mathbb{P}(C_k = 1) = 1 - a$$

On a donc $\mathbb{E}[C_k] = a$ qui correspond à la fraction nuageuse.

2. Modèle de recouvrement. L'overlap est le recouvrement des matériaux sur la verticale. Pour deux couches de 100 km de côté, c'est la proportion de surface qui est couverte par du nuage dans la première couche *et* dans la deuxième couche. Dans le cadre du modèle statistique, cette fraction surfacique devient une probabilité. Le modèle le plus utilisé est une pondération de l'overlap calculé pour deux types de dispositions extrêmes : parfaitement empilé et parfaitement décorrélé. La pondération est faite par un coefficient $e = \exp(-\frac{r}{\lambda_c})$, où r la distance entre le centre des couches et λ_c le coefficient de décorrélation. e peut être interprété comme la probabilité que deux fractions nuageuses soit parfaitement empilées.

Parfaitement empilé. Dans ce cas c'est assez visuel, regardons les graphiques suivants



On en déduit, dans cette configuration, que

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 1) = \min(a_k, a_{k-1}) \quad \text{et} \quad \mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 0) = \max(a_k, a_{k-1}) - a_{k-1}$$

Parfaitement décorrélé. Dans ce cas ci, les événements étant indépendants, la probabilité de l'intersection n'est autre que le produit des deux fractions.

Pondération des deux configurations.

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 1) &= e \times \min(a_k, a_{k-1}) + (1 - e) \times a_k a_{k-1} \\ \mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 0) &= e \times [\max(a_k, a_{k-1}) - a_{k-1}] + (1 - e) \times a_k (1 - a_{k-1}) \end{aligned}$$

dans une couche donnée est l'espérance de Q_k). Dans ce modèle on part des colonnes maillées verticalement et à partir de la formule d'overlap avec une lecture statistique, on échantillonne aléatoirement la composition en eau de chaque couche. Cela produit une réalisation des vecteurs (C_k) et (Q_k) . Une fois cette réalisation obtenue, le rayonnement est résolu de façon déterministe avec un modèle à deux flux classique puisque les couches sont homogènes. Puisque la composition est tirée aléatoirement, pour bien représenter la statistique du milieu et donc pour avoir une estimation fiable de l'effet des nuages sur le rayonnement, il va falloir réaliser un grand nombre de fois cette expérience et faire la moyenne des résultats du modèle à deux flux.

Ici le modèle n'est pas intriqué comme pour les modèles explicités précédemment. On peut modéliser

distinctement le transfert radiatif et la géométrie des nuages. Reprenons l'exemple donné précédemment, si l'on veut faire des hypothèses différentes sur la géométrie des nuages, il n'est pas nécessaire de changer l'entièreté de la formulation en flux, il suffit de changer la procédure d'échantillonnage du milieu qui respectera d'autres hypothèses. Ce modèle est donc une bonne piste à explorer pour désintriquer les modèles de transfert radiatif et de géométrie nuageuse.

Toutefois il reste des pistes d'amélioration. Pour commencer, les modèles à deux flux ne sont pas toujours très précis en fonction des propriétés optiques des couches. Même s'il y a le mot Monte Carlo dans le nom de la méthode, ce n'est pas du Monte Carlo au sens de suivi de photons. On échantillonne une géométrie mais la résolution du rayonnement se fait de façon déterministe, ce qui implique un biais de résolution du transfert radiatif, lié à la discrétisation et aux simplifications qui sont faites pour passer de l'équation du transfert radiatif à un modèle de flux. Mais surtout, avec ce modèle il est impossible de tenir compte des effets 3D des nuages. Serait-il possible de résoudre le rayonnement par méthodes de Monte Carlo directement pour avoir un modèle complètement statistique plutôt que hybride ?

La motivation pour améliorer ce modèle est donnée par le collectif Dephy. Les pistes proposées correspondent au travail de recherche sur les méthodes de Monte Carlo qui est effectué dans le collectif EDStar.

3.2 Résolution par méthodes de Monte Carlo de systèmes couplés et non linéaires

3.2.1 Les méthodes de Monte Carlo pour la physique et le collectif EDStar

Avant de nous attaquer à la résolution de notre problème formulé dans la partie précédente par méthodes de Monte Carlo, il nous faut dresser le décor pour mieux comprendre où en sont ces méthodes, quels sont les enjeux liés à leurs développements et quelle est la place du collectif EDStar dans cette recherche. La recherche de EDStar se structure autour de trois grands sujet. Le premier porte sur l'approfondissement des méthodes de Monte Carlo pour certains problèmes linéaires encore non résolu, ou dont la solution est biaisée par la stratégie numérique d'échantillonnage des chemins par exemple. Le second est d'étendre ces méthodes pour la résolution de problème non linéaire. Pour finir, le troisième concerne le développement des outils informatiques nécessaires aux simulations, notamment développés en étroite collaboration avec l'entreprise Mésos-Star.

Les méthodes de Monte Carlo sont utilisées depuis longtemps pour résoudre des problèmes linéaires, en mathématiques et en physique notamment. Ces méthodes proposent une relecture probabiliste des problèmes déterministes, comme cela est présenté dans la Figure 3. L'un des grands avantages des méthodes de MC est qu'elles donnent une estimation de la solution fiable, sans biais et avec un intervalle de confiance, qui permet de quantifier la précision des résultats. Un autre avantage, donné par la double randomisation est la propriété de passage à l'échelle, autrement dit, l'insensibilité du temps de calcul à la donnée et à la complexité géométrique du modèle. Cela n'est pas toujours trivial à obtenir en pratique et peut demander un grand travail informatique. Par exemple de récents travaux informatiques ont mené à une avancée majeure pour accélérer la résolution de l'équation du transfert radiatif. Ces travaux ont révolutionné le monde de la synthèse d'image en permettant la simulation rapide d'interactions complexes de la lumière avec les surfaces. EDStar travaille à reproduire ce succès dans les domaines de la physique [22] (voir Figure ??).

Si ces méthodes sont très efficaces pour résoudre des problèmes physiques linéaires comme le transfert radiatif standard, ce n'est pas le cas pour les problèmes non linéaires comme la cinétique des gaz par exemple. En effet, dans le linéaire, on a le principe de superposition qui fait que l'on peut échantillonner les trajectoires des particules (qu'on appelle des chemins) indépendamment les uns des autres alors que dans le non linéaire les trajectoires elles-mêmes dépendent de la solution du problème. Ces problèmes non linéaires sont résolus depuis longtemps avec des méthodes déterministes (ou même avec des méthodes de Monte Carlo de type essaim qui simulent toutes les particules en même temps) mais elles présentent des biais de discrétisation et passent difficilement à l'échelle sans compromis sur la modélisation physique. Le collectif EDStar travaille donc à étendre les méthodes de MC au non linéaire tout en préservant les nombreux avantages cités auparavant [3].

3.2.2 MCMET : un projet ANR à la jonction des communautés Dephy et EDStar

La rencontre des questions amenées par Dephy pour résoudre le rayonnement dans un milieu nuageux modélisé comme un milieu stochastique Markovien binaire, avec les recherches de EDStar, se fait dans un

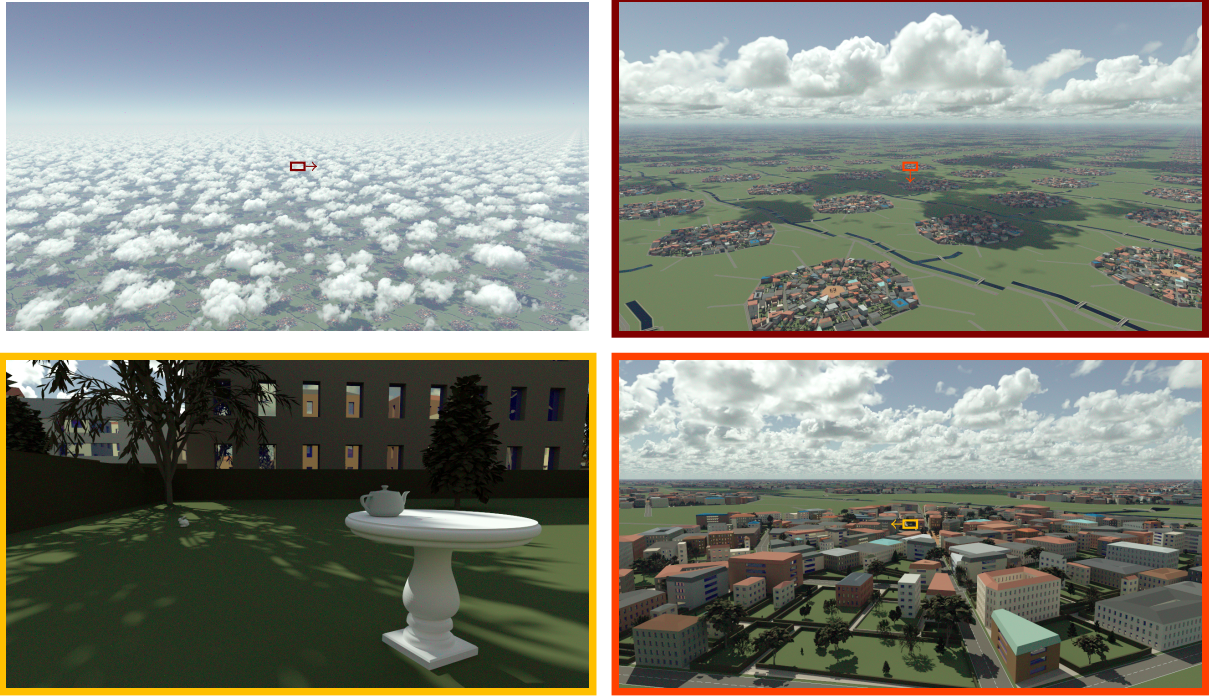


FIGURE 2 – Extrait d’un article de Villefranche et al. sur les méthodes de Monte Carlo appliquées à la physique et les différentes avancées notamment en synthèse d’image. On peut observer des images de synthèse réalisées par méthodes de Monte Carlo à partir de champs nuageux simulés par LES et d’une géométrie décrivant une ville dans ses moindres détails. Les images en page de garde sont aussi des images de synthèse de nuages simulés par LES.

projet de recherche qui a commencé en mars 2024. Le projet Méthodes de Monte Carlo pour la Transition Énergétique (MCMET, https://nastar.laplace.enseeiht.fr/pages/anr_mcmec.html) est un projet financé par l’Agence National de la Recherche (ANR) et porté par le collectif EDStar. Il s’agit d’un programme de recherche sur trois ans pour explorer une partie des questions de recherches énoncées précédemment.

Le projet MCMET réunit trois applications et donc trois communautés : modélisation du rayonnement pour le climat, modélisation de procédés solaires pour l’énergie, thermique du bâtiment ; autour d’une problématique commune. Il s’agit de simuler par Monte Carlo des systèmes qui sont modélisés par une équation cinétique comme écrite en (1), mais où la fréquence de collision n’est pas connue car elle est elle-même solution d’une équation.

$$\partial_t f + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} f = -\nu(f_i, \pi) \left(f - \mathcal{P}_{reac} f * (f_i) - \mathcal{P}_{scat} \int p(\vec{c}|\vec{c}') f' d\vec{c}' \right) \quad (1)$$

Dans ce problème, on cherche à déterminer f la fonction solution de l’équation (1). La difficulté vient du terme ν qui n’est pas connu, on a alors un système couplé non linéaire. ν peut en plus être fonction de f auquel cas le couplage est bidirectionnel. Dans la suite de ce rapport nous nous concentrerons sur la partie climat et donc sur l’équation du transfert radiatif que nous allons retrouver à partir de l’équation cinétique générale.

- **Grandeur étudiée f**

La grandeur que nous cherchons à caractériser est la Luminance, notée $\mathcal{L}$, pour une position x et une direction $\vec{\omega}$ données. La luminance correspond à une quantité de photons (ou plus précisément d’énergie portée par ces photons) par unité de surface et par unité d’angle solide. C’est une quantité en watts par mètres carrés par stéradian.

- **Dépendance en temps**

La vitesse de la lumière étant très grande devant les temps caractéristiques des phénomènes étudiées, on considère que le problème est stationnaire, i.e. il n’y a pas d’évolution dans le temps : $\partial_t f = 0$.

- **Vecteur $\vec{c}$**

FIGURE 3 – Illustration d’une pratique formelle des méthodes de Monte Carlo pour résoudre un problème intégral (ici une somme discrète composée de deux termes).

Calculer $4 + 1$ par Monte Carlo

Dans cet exemple, on cherche à calculer $x = 4 + 1$

1. Formulation probabiliste. La première étape est de réécrire x comme l’espérance d’une variable aléatoire en introduisant un jeu de probabilités arbitraires :

$$x = p \times 4/p + (1 - p) \times 1/(1 - p)$$

x est l’espérance d’une variable aléatoire X qui est telle que p est la probabilité associée à l’évènement $X = 4/p$ et $(1 - p)$ est la probabilité associée à l’évènement $X = 1/(1 - p)$.

2. Résolution par méthodes de Monte Carlo. Pour estimer x , il suffit d’échantillonner un grand nombre de réalisations de X et d’en prendre la moyenne :

Pour i allant de 1 à N :

- Échantillonner u uniformément entre 0 et 1
- Si $u < p$, retenir $x_i = 4/p$
- sinon retenir $x_i = 1/(1 - p)$

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} \mathbb{E}[X] = x \quad \text{et} \quad s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} \text{Var}(X)$$

3. Double randomisation. Lorsque l’une des issues est une donnée y qui n’est pas connue ($X = F_X(y)$) et que l’on peut l’exprimer comme une espérance, alors

$$\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[F_X(y)] = \mathbb{E}[F_X(\mathbb{E}[Y])] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[F_X(Y)]] = \mathbb{E}[F_X(Y)],$$

à condition que F_X soit linéaire. On a remplacé l’espérance par la variable aléatoire et on peut donc empiler l’échantillonnage des variables aléatoires dans l’équation.

Reprenons $4 + 1$ et supposons que 4 est une variable y inconnue dont on a une équation, $y = 3 + 1$. De la même façon que pour x , on a

$$y = a \times 3/a + (1 - a) \times 1/(1 - a)$$

y est l’espérance d’une variable aléatoire Y qui est telle que a est la probabilité associée à l’évènement $Y = 3/a$ et $(1 - a)$ est la probabilité associée à l’évènement $Y = 1/(1 - a)$. Ainsi,

$$x = p \times \left\{ \frac{a \times \{3/a\} + (1 - a) \times \{1/(1 - a)\}}{p} \right\} + (1 - p) \times \{1/(1 - p)\}$$

Lors de la résolution, là où l’on avait auparavant échantillonné $4/p$, on a cette fois-ci $\mathbb{E}[Y]/p$ que l’on remplace par Y/p et donc pour une réalisation x_i de X , on a besoin que d’une réalisation y_i de Y , et non pas d’estimer $\mathbb{E}[Y]/p$ ce qui nécessiterait un grand nombre de tirage (pour chaque réalisation x_i).

Le terme $\vec{c} = c\vec{\omega}$ avec c la vitesse des particules. Comme nous étudions des photons cette vitesse est la même pour toutes les particules, c’est donc une constante valant la vitesse de la lumière. Ici nous ne sommes pas à une constante près, on ne conserve donc pas c . $\vec{\omega}$ correspond à la direction de la luminance étudiée.

• Fréquence de collision ν

La fréquence de collision ν , représente dans notre problème le coefficient d’extinction, notée k_e . Elle dépend du milieu traversé qui est lui-même donné par un modèle probabiliste. Ainsi la fréquence de collision dépend d’une variable aléatoire, c’est donc elle-même une variable aléatoire.

• Terme source f^*

Le terme source que nous noterons $\mathcal{L}^*$, représente les photons émis par le milieu. Dans notre

problème, la seule source de rayonnement est le soleil, qui sera modélisé dans les conditions aux limites plutôt que comme une source interne au système. Nous considérons donc ce terme source comme nul. Même si ce terme est nul, nous le conservons car nous verrons plus tard qu'il est utile à la formulation en intégrale de chemin.

- **Terme de diffusion**

Le terme en intégrale correspond à la diffusion avec p qui correspond aux fonctions de phases de diffusion de Mie pour les nuages et de Rayleigh pour le ciel clair. Dans le cas général on la notera φ . $\mathcal{P}_{scat}$ correspond à l'albédo de diffusion simple, noté ssa , qui donne le taux de diffusion par rapport à l'extinction totale (absorption + diffusion : $ssa = k_d/k_e = k_d/(k_a + k_d)$).

- **Équation du transfert radiatif**

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}(x, \vec{\omega})}{\partial x} = -k_e \mathcal{L}(x, \vec{\omega}) + k_e \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^* + ssa \int_{4\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right]} \quad (2)$$

En on donne $\mathcal{L}_0$ la condition aux limites en $x = x_0$.

Nous savons résoudre ce problème dans le cas où la fréquence de collision est connue (cf Figure 4). Dans le cas qui nous intéresse, k_e est une variable aléatoire (une fonction aléatoire de l'espace), et on cherche l'espérance de la luminance pour une distribution de k_e , c'est à dire une distribution de milieux nuageux. Peut-on coupler notre modèle statistique de k_e et l'équation du transfert radiatif et résoudre en un seul algorithme le problème couplé sans avoir besoin d'échantillonner d'abord des réalisations du milieu ?

FIGURE 4

Résolution de l'Équation du Transfert Radiatif par méthode de Monte Carlo

Pour cet exemple de résolution du problème par méthode de Monte Carlo, on se place dans un cadre simple d'un milieu 1D semi infini avec une condition initiale en un point x_0 . Dans ce cas on peut réécrire notre problème de la façon suivante :

$$\mathcal{L}(x, \vec{\omega}) = e^{-k_e x} \mathcal{L}_0 + \int_0^x k_e e^{-k_e(x-l)} \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^* + ssa \int_{4\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right] dl$$

1. Formulation sous forme d'espérance. Pour résoudre ce problème par les méthodes de Monte Carlo, il nous faut exprimer $\mathcal{L}$ comme une espérance. Pour cela il nous faut reconnaître le théorème du transfert qui nous dit : Soient L une v.a. de densité p_L et g une fonction continue sur $\mathcal{D}_L$, on pose Y une autre v.a. telle que $Y = g(L)$. Alors

$$\mathbb{E}[Y] = \mathbb{E}[g(L)] = \int_{\mathcal{D}_L} g(l) p_L(l) dt$$

On cherche donc à reformuler notre problème avec le membre de droite regroupé sous une même intégrale, avec une fonction continue sur $\mathbb{R}$ et une densité de probabilité. On obtient (cf annexe) :

$$\mathcal{L}(x, \vec{\omega}) = \underbrace{\int_0^{+\infty} k_e e^{-k_e l} dl}_{(1)} \underbrace{\{ \mathcal{L}_0 H(l > x) + H(l < x) \}}_{(2)} \underbrace{[(1 - ssa) \mathcal{L}^* + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x - l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}']}_{(3)} \quad (3)$$

Ainsi, si l'on pose les v.a. suivantes, on a bien que notre solution est une espérance.

$$L = \begin{cases} [0; \infty[\\ p_L(l) = k_e e^{-kl} \end{cases} \quad \text{et} \quad Y = g(L) = \mathcal{L}_0 H(L > x) + H(L < x) \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^* + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x - L, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right]$$

2. Lecture en intégrale de chemin. Pour donner du sens à cette équation on va en proposer une lecture en partant du point où l'on veut la luminance et en regardant comment les sources et la condition aux limites vont impacter la luminance au point cherché. Pour cela, il nous faut réaliser un grand nombre de fois l'expérience suivante :

- 1 On échantillonne le lieu de collision. Pour cela on tire une distance l selon une loi exponentielle et on va au lieu de la collision $x - \vec{\omega}l$.
- 2 On teste si la collision est située après le bord du domaine, si oui on "ramène" la condition aux limites, c'est à dire on pose $y = \mathcal{L}_0$, sinon on regarde le reste des contributions possibles.
- 3 Comme $ssa < 1$, on peut voir la partie trois comme l'espérance d'une fonction d'une variable aléatoire de Bernoulli avec comme issue soit un évènement de diffusion soit d'émission par une source. On peut donc échantillonner cette loi avec une probabilité de valeur ssa . Pour cela on échantillonne u selon une loi uniforme, si $u < ssa$ on échantillonne une direction pour étudier les contributions qui en viennent. C'est à dire on se place au lieu de la collision et pour cette nouvelle direction on cherche à calculer une réalisation de la luminance. C'est donc un algorithme récursif, on recommence à l'étape 1. Si $u > ssa$ on ramène la source, i.e. on pose $y = 0$.

On peut résoudre cette équation avec un autre point de vue, en partant de la condition aux limites et en suivant les photons qui se propagent dans le domaine. On considère alors que les photons sont soit absorbés (et non émis) soit diffusés. Cette lecture donnera naissance à un algorithme différent de la première mais produit une solution strictement égale.

4 État de l'art

4.1 Formulation de l'équation cinétique avec collision nulle et ses applications

Dans la littérature, la question de couplage est déjà présente avec notamment un exemple entre un modèle physique de la fréquence de collision et l'équation cinétique. Cette question fut travaillée dans le collectif EDStar notamment par Mathieu Galtier, Guillaume Terrée et Yaniss Nyffenegger-Pere.

L'une des propositions pour résoudre l'équation cinétique dans le cas non homogène est intitulée collision nulle [4]. Cette "astuce de physiciens" consiste à considérer le milieu traversé comme homogène. Pour cela on majore la fréquence de collision par un coefficient constant, ainsi on considère le milieu traversé comme homogène et plus dense en tous points que le milieu initial. Comme le majorant est choisi arbitrairement, les lieux de collision ne dépendent plus des propriétés du milieu d'origine. En contrepartie, lorsque l'on simule les particules, on ne prend pas en compte une certaine portion de collisions qui correspondent aux collisions échantillonnées en trop. Pour imaginer cette proposition, on peut imaginer qu'on ajoute des fausses particules pour rendre le milieu traversé homogène et qu'ensuite on rejete une partie des collisions qui correspond aux collisions avec des fausses particules.

Mathieu Galtier dans sa thèse [7] a proposé une formulation en intégrale de chemin de l'ETR en collision nulle (cf [5] et Figure 5). Le formalisme auquel il a abouti a permis la création de nouveaux estimateurs [6], a ouvert de grandes possibilités de couplages [8] et surtout a permis plus tard d'étendre les applications de collision nulle pour résoudre des problèmes non linéaires [21, 20].

FIGURE 5

Formulation en intégrale de chemins de l'ETR en collision nulle

Soit un domaine Ω , et un point x appartenant à Ω , l'équation du transfert radiatif dans un milieu non homogène, avec une condition de Dirichlet au bord, peut s'écrire de la façon suivante

1. Formulation du problème.

$$\mathcal{L}(\vec{x}, \vec{\omega}) = \int_0^{+\infty} \hat{k} e^{-\hat{k}l} dl \left\{ H(\vec{x} - l\vec{\omega} \notin \Omega) \mathcal{L}_0 + H(\vec{x} - l\vec{\omega} \in \Omega) \right. \\ \left. \underbrace{\left[\left(1 - \frac{k_e(\vec{x} - l\vec{\omega})}{\hat{k}}\right) \mathcal{L}(\vec{x} - l\vec{\omega}, \vec{\omega}) + \frac{k_e(\vec{x} - l\vec{\omega})}{\hat{k}} \left((1 - ssa) \mathcal{L}^* + ssa \int_{4\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(\vec{x} - l\vec{\omega}, \vec{\omega}') d\omega' \right) \right]}_{(*)} \right\} \quad (4)$$

avec $\hat{k}$ le majorant de la fréquence de collision et $(1 - k_e/\hat{k})$ la proportion de collision nulle.

2. Définition d'une nouvelle variable aléatoire. Dans cette équation, en plus des v.a. qu'on avait déjà définies pour résoudre l'ETR dans le cas homogène, on va définir une nouvelle v.a. pour probabiliser la somme (*). Cette somme peut être interprétée comme l'espérance d'une fonction d'une v.a. de Bernoulli. Avec probabilité $(1 - \frac{k_e(x-l\vec{\omega})}{\hat{k}})$, il s'agit d'une collision nulle et l'issue est $\mathcal{L}(\vec{x} - l\vec{\omega}, \vec{\omega})$, la luminance au point, la collision n'a eu aucun effet et on continue tout droit. Avec une probabilité $\frac{k_e(x-l\vec{\omega})}{\hat{k}}$, il s'agit d'une vraie collision que l'on traite comme dans le cas homogène.

Suite à cette découverte, Mathieu Galtier a fait une proposition de couplage entre l'ETR et un modèle spectroscopique de la fréquence de collision. Dans ce modèle, le coefficient d'absorption k_a ($k_e \times (1 - ssa)$) est décrit comme une somme de raies d'absorptions.

$$k_e = \sum_{j=1}^N h_{j,\lambda}$$

Comme k_a une somme, il est possible de l'interpréter comme l'espérance d'une variable aléatoire. Ainsi, grâce à la formulation en intégrale de chemin et à la double randomisation, il est possible de mettre en place ce couplage entre ETR et spectroscopie. Dans son article [8] Mathieu Galtier aboutit donc à une proposition fonctionnelle. Cette proposition est ensuite retravaillée dans la thèse de Yaniss Nyffenegger-Pere [13]. Son travail, à la frontière entre physique fondamentale et synthèse d'image, permet d'étendre

les bonnes propriétés des méthodes Monte Carlo, rendant donc ce couplage insensible à la complexité du modèle de raies d'absorptions [14]. Par ailleurs, Guillaume Terrée a retravaillé la proposition de Mathieu Galtier pour aboutir à un nouveau formalisme : il extrait l'abstraction de probabiliser une probabilité. Cela, lui permet d'étendre tout le formalisme de collision nulle à son problème qui est de résoudre l'équation cinétique des gaz, qui est non linéaire car la fréquence de collision est égale à la grandeur recherchée ($\nu = f$). Tout le formalisme et les exemples posés par le collectif EDStar nous donnent des bases solides pour travailler le couplage entre l'équation du transfert radiatif et un milieu stochastique.

4.2 Olson et les milieux stochastiques markoviens

Emily Vu et Aaron J. Olson sont des chercheuses des Sandia National Laboratories, qui travaillent sur la résolution du transfert radiatif dans des milieux stochastiques. Dans leurs articles, ils posent la définition des milieux markoviens et proposent un formalisme permettant le couplage entre milieux markoviens et ETR. Ce couplage s'appuie sur la méthode des collisions nulles, même si elle n'est pas nommée ainsi. Le formalisme posé par Vu et Olson dans leur article [23] aboutit à un couplage non biaisé de l'ETR (incluant la diffusion, mais en 1D), avec un milieu markovien binaire ayant des propriétés statistiques homogènes. Il nous offre donc la preuve que ce couplage est possible et donne même des pistes de travail. Cela nous permet d'attaquer le problème avec la certitude qu'une solution est possible et que nous sommes en bonne voie.

Pour réaliser le couplage en collision nulle, Vu et Olson travaillent sur les probabilités de transition, qui sont les probabilités d'être dans le matériau α (respectivement, β) au point x_1 , sachant que l'on était dans le matériau β (respectivement, α) au point x_2 à une distance r de x_1 . Ce sont donc des probabilités conditionnelles qui modélisent la corrélation entre les points échantillonnés dans le milieu. Cela demande de stocker de l'information au cours de la simulation (la position des points et le matériau dans lequel on était). En pratique dans sa méthode, il échantillonne une distance r avant la prochaine collision, en exponentielle de $\hat{k}$ selon l'algorithme de collision nulle. Puis il calcule la probabilité d'être dans le milieu α ou β , à partir des probabilités de transition et des points précédemment échantillonnés.

Comme on le verra dans la suite, ces probabilités de transition font apparaître une exponentielle d'une longueur de décorrélation λ_c , qui est la même que celle apparaissant dans le modèle d'overlap décrit en Figure 1. Cela nous laisse supposer que nous allons pouvoir établir en lien entre ces modèles et donc que nous allons pouvoir adapter la proposition d'Olson pour répondre à nos contraintes des modèles climatiques.

En plus du travail réalisé sur les milieux markoviens 1D, Vu et Olson font une proposition pour étendre le couplage aux milieux markovien 3D [15]. Cette proposition est intéressante mais elle est biaisée. Ce biais vient d'une hypothèse simplificatrice pour ne pas prendre en compte toutes les corrélations entre les points. Cela permet de réduire la complexité de la probabilité de transition qui semble ingérable au vu de la quantité d'information à stocker et à traiter. Cela ouvre de nombreuses questions de recherche, notamment sur la possibilité d'étendre le couplage au 3D grâce à un travail théorique sur les probabilités conditionnelles, car on n'a pas l'expression sans biais, et un travail avec MesoStar sur la question informatique pour gérer la complexité des données. Un axe de travail est également d'étendre ces propositions à des milieux à statistiques non homogènes.

4.3 Propositions de couplage en sciences de l'atmosphère

Raphaël Lebrun dans sa thèse co-encadrée par Najda Villefranque, a proposé un couplage de l'ETR avec une description Markovienne des nuages, caractérisée par des statistiques non homogènes. Il s'appuie pour cela sur les procédures d'échantillonnage des profils nuageux qui sont réalisées à partir des modèles d'overlap dans le modèle MCICA [17]. Ces modèles d'overlap sont discrétisés sur la verticale, et la procédure d'échantillonnage fait apparaître des probabilités de transition pour échantillonner la présence de nuage ou non dans chaque couche. Raphaël Lebrun propose un modèle dans lequel il commence par découper les couches des colonnes du GCM en sous-couches pour raffiner la description verticale de l'overlap des nuages, tout en restant discrétisé [11]. Pour le couplage, il a d'abord proposé au cours de la procédure de suivi de photon en collision nulle, d'échantillonner la présence ou non de nuages dans la maille (sous-couche) uniquement au moment des collisions. Comme le modèle d'overlap est discret, la réalisation vaut pour toute la maille, jusqu'à la fin du chemin. Mais il s'est heurté à un problème en présence de diffusion : lorsque le photon remonte dans une couche non échantillonnée entre deux couches

qui ont déjà été échantillonnées, le modèle d'overlap qu'il utilisait ne donnait pas directement la probabilité conditionnelle qui tient compte de ces deux informations. Pour pallier à ce problème, il a proposé une autre procédure dans laquelle il remplit, au fur et à mesure, les sous-couches discrétisées avec le matériau rencontré (nuage ou ciel clair) lors de la descente du photon dans l'atmosphère.

Il n'est donc pas allé au bout de sa proposition mais c'est une bonne piste d'exploration du problème de couplage entre l'équation du transfert radiatif et le modèle d'overlap et cela nous donnera plus tard les clés pour établir le lien entre milieu markovien et overlap et étendre le formalisme d'Olson aux milieux markoviens à statistiques non homogènes. À part le traitement de la diffusion, l'un des enjeux pour étendre sa proposition est d'ajouter les effets 3D des nuages dans ce modèle. En effet, le rayonnement est calculé en pseudo 3D c'est à dire que les photons se déplacent en 3D mais les colonnes sont considérées horizontalement infinies, donc par exemple les nuages n'ont pas de bord. De plus, la discrétisation du modèle d'overlap sur le maillage vertical du GCM (ou même avec un découpage en sous-couches) induit un biais qui n'a pas encore été caractérisé. Un autre enjeu est donc d'établir le modèle couplé et continu, c'est à dire sans passer par une discrétisation du modèle d'overlap.

4.4 Problématique : établir un modèle couplé complet en retravaillant les briques existantes dans les différentes communautés dans une philo Unix

La recherche au cœur de mon sujet de stage se trouve à la confluence entre les méthodes de Monte Carlo, la paramétrisation et les milieux markoviens. Dans un premier temps il a fallu que je me familiarise avec les méthodes de Monte Carlo et notamment avec la formulation en intégrale de chemin de l'ETR en collision nulle. Puis j'ai étudié les milieux markoviens et les propositions de couplage d'Olson. Je me suis ensuite appuyée sur le travail amorcé par Raphaël Lebrun dans sa thèse, pour établir un lien entre les milieux markoviens et le modèle d'overlap de la communauté atmosphère. Tout ce travail m'a permis de proposer une revisite du travail d'Olson, adapté aux contraintes de Dephy, dans le formalisme d'EDStar. L'aboutissement de ce travail, en plus du formalisme posé, est l'élaboration d'un modèle couplé de l'équation du transfert radiatif avec les milieux markoviens à statistique non homogène, en collision nulle, adapté à une résolution par les méthodes de Monte Carlo.

5 Couplage de l'ETR et de l'échantillonnage d'un milieu Markovien

Dans cette partie nous allons présenter comment nous avons créé le modèle couplé en menant de front un travail théorique sur le modèle et une mise en pratique en implémentant sa résolution par les méthodes de Monte Carlo. Nous avons choisi de présenter notre travail sous l'angle des résultats obtenus à partir de la mise en application de nos codes, même si la plus grande partie du travail pendant le stage a été le développement du modèle, avec l'objectif d'avoir un modèle de plus en plus complet pour répondre aux besoins des GCMs.

Dans chaque section on présente ainsi une partie des développements théoriques, et une question de recherche et les résultats associés. Dans un premier temps (Section 5.1) nous nous concentrerons sur la caractérisation des estimateurs Monte Carlo, en termes de variance et de temps de calcul. Nous commencerons par le faire pour un premier modèle d'ETR en collision nulle dans un milieu homogène 1D pour illustrer la démarche. Puis nous caractériserons de façon similaire les nouveaux estimateurs correspondant à un slab markovien à statistique homogène (toujours en 1D). Dans un second temps (Section 5.2) nous nous concentrerons sur l'étude du biais associé à la discrétisation en couches telle que réalisée dans le modèle de Raphaël Lebrun. Pour cela nous expliquerons comment nous avons étendu le modèle de Vu et Olson pour tenir compte de statistiques non homogènes (et en laissant les photons se déplacer en 3D), puis nous verrons comment le biais se comporte en fonction des paramètres du modèle.

Tous mes programmes sont implémentés en C et utilisent les bibliothèques développées par Meso-Star, qui forment l'environnement de développement "Star-Engine" <https://gitlab.com/meso-star/star-engine/>. Nous avons également implémenté une résolution du problème en non couplé, afin de pouvoir vérifier nos résultats. Pour ce faire on génère aléatoirement des réalisations du milieu markovien et on résout l'ETR dans chacun des milieux générés, puis on prend la moyenne des luminances ainsi estimées. Cette méthode présente certaines limites que nous détaillerons plus tard.

5.1 Caractérisation des estimateurs et du temps de calcul

Pour commencer, rappelons ce qu'est un estimateur. Un estimateur est une fonction de variable aléatoire, c'est donc lui même une variable aléatoire, qui lorsqu'on la réalise permet d'estimer numériquement certaines caractéristiques de loi. Nous allons utiliser ici la moyenne empirique notée $\bar{X}_N$ et la variance empirique corrigée notée S^2 , données par les formules suivantes :

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}[X] = x \quad \text{et} \quad S^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X}_N)^2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \text{Var}(X)$$

où $(X_i)_{i=1,\dots,N}$ est une suite de variables aléatoire indépendantes et identiquement distribuées, de même loi que X qui est la variable aléatoire dont l'espérance est la grandeur que l'on cherche. Pour faire une réalisation de l'estimateur $\bar{X}_N$ on fait donc une réalisation de chaque variable X_i qui sont toutes de mêmes loi (à ne pas confondre avec faire N réalisations d'une unique variable aléatoire). Ensuite on utilise le Théorème Central Limite pour dire que l'estimateur $\bar{X}_N$ converge en loi (quand $N \rightarrow \infty$) vers une loi normale d'espérance $\mathbb{E}[X]$ et d'écart type $\sqrt{\text{Var}(X)/N}$. C'est à dire que les réalisations de la moyenne empirique vont être distribuées en gaussienne, et l'écart type décroît proportionnellement à la racine du nombre de variables i.i.d. qui contribuent à la moyenne empirique. Donc plus N est grand et plus l'intervalle de confiance pour l'estimation est petit.

5.1.1 Formule analytique pour un cas simple : collision nulle dans un slab homogène

Dans un premier temps nous chercherons à caractériser les estimateurs utilisés pour résoudre l'ETR en collision nulle dans un slab homogène sans diffusion. Il existe différentes façons de résoudre ce problème en utilisant les méthodes de Monte Carlo, nous nous focalisons ici sur deux méthodes que l'on décide de nommer *proba* et *sakado*.

Ces deux résolutions étant différentes, c'est à dire que les variables aléatoires échantillonnées ne sont pas les mêmes. Cela produit donc des estimateurs différents. Il est intéressant pour comparer les deux méthodes de caractériser les estimateurs en fonction du paramètre libre $\hat{k}$. Nous allons notamment comparer pour les deux méthodes, comment évolue le temps de calcul pour atteindre une précision relative de 1%, en fonction de $\hat{k}$.

Pour comprendre la différence entre la résolution en mode proba et celle en mode sakado, reprenons la formulation en intégrale associée à l'ETR en collision nulle dans un slab homogène. Notons que même si la formulation est en collision nulle, le slab étudié ici est homogène donc k_e est constant. Nous cherchons à calculer la luminance $\mathcal{L}$ en un point donné se trouvant à une distance $x = H$ du bord situé en $x = 0$ auquel on applique une condition de Dirichlet $\mathcal{L}_0$. Pour simplifier on pose $\mathcal{L}_0 = 1$. Rappelons également que l'on considère dans notre modèle qu'il n'y a pas de source i.e. $\mathcal{L}^* = 0$ donc la solution est directement proportionnelle à $\mathcal{L}_0$. Comme nous sommes en 1D sans diffusion nous pouvons nous séparer, pour le moment, de la direction $\vec{\omega}$ qui reste égale à $-\vec{e}_1$. On rappelle que le symbole H est utilisée pour représenter une fonction test qui vaut 1 si la condition est vraie et 0 sinon :

$$\mathcal{L}(x) = \int_0^{+\infty} \hat{k} e^{-\hat{k}l} dl \left\{ \mathcal{L}_0 H(x-l < 0) + H(x-l > 0) \left[\left(1 - \frac{k_e}{\hat{k}}\right) \mathcal{L}(x-l) + \frac{k_e}{\hat{k}} \mathcal{L}^* \right] \right\}$$

Pour résoudre ce problème par les méthodes de Monte Carlo, il nous faut lire cette équation comme une espérance, pour cela on utilise le théorème du transfert et on pose les variables aléatoires suivantes :

$$L = \begin{cases} [0; +\infty[\\ p_L(l) = \hat{k} e^{-\hat{k}l} \end{cases} \quad \text{et} \quad Y = \mathcal{L}_0 H(x-l < 0) + H(l-x > 0) \left[\left(1 - \frac{k_e}{\hat{k}}\right) \mathcal{L}(x-l) + \frac{k_e}{\hat{k}} \mathcal{L}^* \right]$$

Pour traiter la suite de l'équation, dans le cas où la collision a lieu dans le milieu, deux possibilités s'offrent à nous pour évaluer la somme suivante :

$$\left(1 - \frac{k_e}{\hat{k}}\right) \mathcal{L}(x-l) + \frac{k_e}{\hat{k}} \mathcal{L}^*$$

- **Proba**

On peut ici faire le choix de lire cette somme comme l'espérance d'une fonction d'une v.a. de Bernoulli, comme cela est proposé dans l'encadré Figure 5, à la seule différence qu'ici il n'y a pas de diffusion, donc lorsqu'il y a une vraie collision on ramène forcément la source (qui vaut 0 ici) et le chemin s'arrête.

- **Sakado**

On peut aussi faire le choix d'évaluer cette somme de façon déterministe. Pour cela il faut calculer la somme récursive en évaluant à chaque itération la luminance au nouveau point, jusqu'à ce que l'on atteigne la condition initiale. Ici le terme source étant considéré comme nul, il suffit de multiplier le poids de la réalisation à chaque itération. Autrement dit la somme vaut $(1 - k_e/\hat{k})^n$, avec n le nombre de fois que le photon a collisionné avant de trouver la condition aux limites.

Comme ce problème est assez simple, nous pouvons caractériser analytiquement ces deux estimateurs (cf annexes). Comme la grandeur calculée par les deux méthodes est la même, il est évident que dans les deux cas l'espérance est égale. Ce n'est en revanche pas le cas de la variance qui va être différente. Regardons comment évolue la variance en fonction du paramètre $\hat{k}$:

- Variance en mode proba :

$$\text{Var}(Y) = e^{-kH} (1 - e^{-kH})$$

- Variance en mode sakado :

$$\text{Var}(Y) = \exp \left(-\hat{k}H \left[1 - \left(\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}} \right)^2 \right] \right) - \exp(-2kH)$$

On constate que la variance en mode proba ne dépend pas de $\hat{k}$, alors que la variance en mode sakado diminue lorsque $\hat{k}$ augmente. Cela veut dire qu'il faut moins de chemins en mode sakado qu'en mode proba pour atteindre un niveau de confiance donné. Ce résultat est très intéressant, mais ne faisons pas de conclusion hâtive, car cela ne suffit pas à dire que la méthode en mode sakado est plus rapide en pratique pour atteindre une erreur relative de 1%. En effet les chemins en mode proba peuvent s'arrêter alors qu'en mode sakado ils vont toujours traverser tout le slab et donc faire plus de collisions ce qui peut être plus long en temps de calcul.

Pour étudier analytiquement le temps de calcul, nous allons donc calculer le nombre de collisions pour atteindre une erreur relative de 1%, notée $nb_colli_{1\%}$. Nous choisissons cette grandeur puisqu'elle est

proportionnelle au temps de calcul, dans le cas où l'opérateur de collision est indépendant de la procédure d'échantillonnage. Cette grandeur est le produit du nombre de chemins qu'il faut échantillonner pour avoir un écart type relatif de 1%, avec le nombre de collisions par chemin en moyenne. En mode proba il faut plus de chemins mais en mode sakado il faut moins de chemins mais avec plus de collisions. Et le nombre de collisions dépend du paramètre $\hat{k}$ qui est la fréquence de collisions. Après calculs (cf annexes), on obtient :

- $nb_colli_{1\%}$ en mode proba

$$nb_colli_{1\%} = e^{-kH}(1 - e^{-kH}) \times e^{2kH} \times 10^4 \times \left[\frac{\hat{k}}{k} (1 - e^{-kH}) \right]$$

- $nb_colli_{1\%}$ en mode sakado

$$nb_colli_{1\%} = \{ \exp(-\hat{k}H[1 - (\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}})^2]) - \exp(-2kH) \} \times e^{2kH} \times 10^4 \times \hat{k}H$$

On a tracé le $nb_colli_{1\%}$ en fonction de $\hat{k}$ (Figure 6), en posant $H = 10$ et $k_e = 0.1$. On peut en conclure que le mode sakado permet d'atteindre plus rapidement 1% d'erreur relative, sauf lorsque $\hat{k}$ est très proche de k_e . Plus précisément on voit que pour un majorant largement supérieur à la fréquence de collision, le temps de calcul reste stable en mode sakado alors qu'il croît linéairement avec $\hat{k}$ en mode proba.

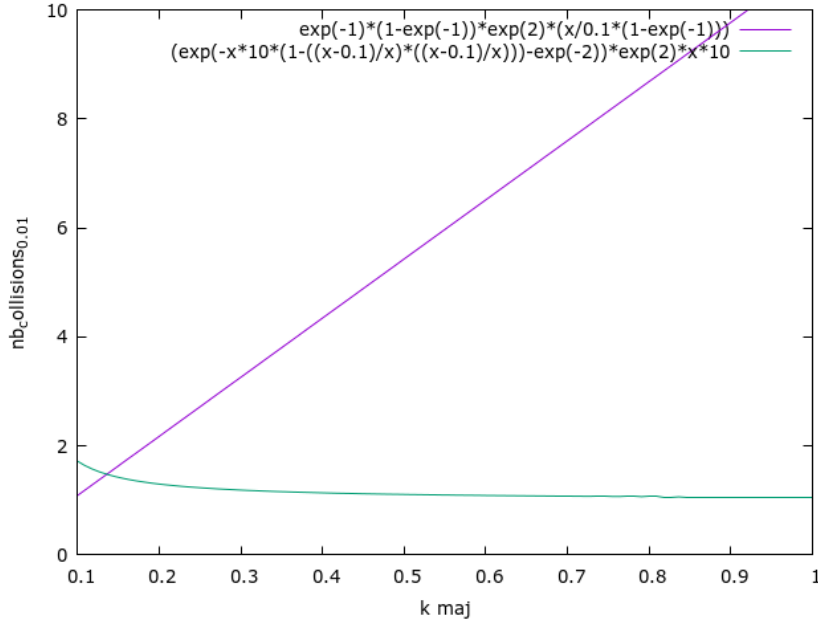


FIGURE 6 – On peut observer sur cette figure $nb_colli_{1\%}$ en fonction de $\hat{k}$, en violet en mode proba et en vert en mode sakado. On peut observer que la courbe verte converge vers de petites valeurs alors que la courbe violette augmente linéairement par rapport à $\hat{k}$.

Les calculs étant bien plus compliqués pour les configurations suivantes, i.e. quand on ajoute la diffusion et que l'on passe dans un milieu markovien, on fait donc le choix de ne calculer que numériquement le nombre de collisions pour atteindre 1% d'erreur relative, donné par la formule suivante :

$$nb_colli_{1\%} = \left(\frac{s}{0.01 \times \bar{x}_N} \right)^2 \times nb_colli_N, \quad (5)$$

qui vient du fait que l'écart type de Monte Carlo décroît en racine de N , donc étant donnée une estimation $\bar{x}_N$ on peut trouver avec une règle de trois le nombre $nb_colli_{1\%}$ qu'il faudrait pour atteindre un écart type de Monte Carlo donné. Ainsi on obtient numériquement $nb_colli_{1\%}$ en fonction de $\hat{k}$, pour un slab homogène avec diffusion, tracé sur la Figure 7. On constate que le temps de calcul reste plus performant pour l'algorithme sakado que pour le proba, mais cela est beaucoup moins marqué que sans diffusion.

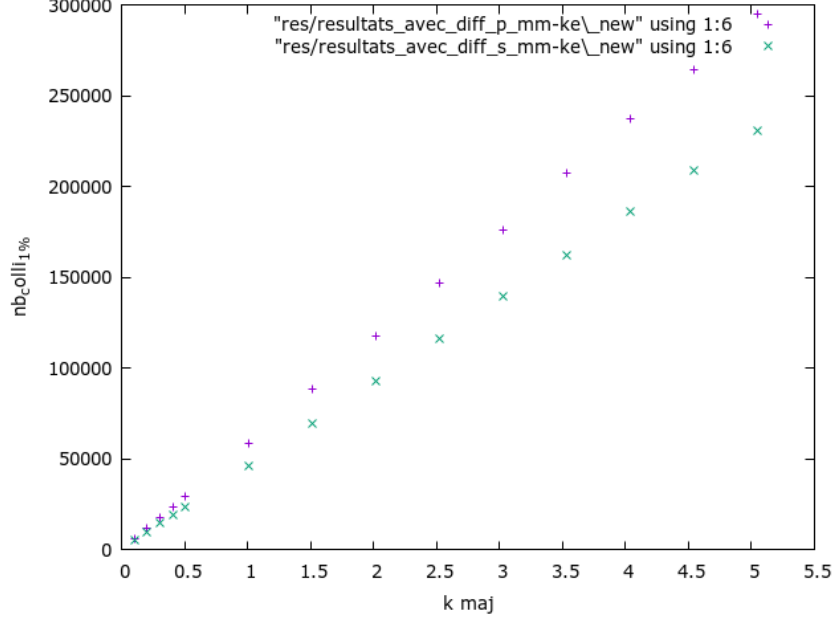


FIGURE 7 – On peut observer sur cette figure $nb_colli_{1\%}$ en fonction de $\hat{k}$ pour la résolution de l'ETR en collision nulle avec diffusion, en violet en mode proba et en vert en mode sakado. On peut observer que les deux courbes croissent en fonction de $\hat{k}$ mais la violette croit plus vite que la verte.

5.1.2 Construction et caractérisation des estimateurs pour un slab markovien sans diffusion

Afin de pouvoir caractériser numériquement les estimateurs permettant de résoudre de façon couplée l'ETR en collision nulle dans un slab markovien, il faut commencer par implémenter la résolution de ce problème. Pour cela nous avons dû travailler la proposition de Vu et Olson sur le couplage. Commençons par présenter les milieux markoviens.

Nous étudions ici les milieux markoviens 1D binaires, composés d'un mélange aléatoire de matériau α et de matériau β . Ces matériaux sont caractérisés statistiquement par une v.a. nommée la longueur de corde, suivant une loi exponentielle de paramètre λ_α et λ_β , pour les matériaux α et β respectivement. Cette v.a. modélise la distance au bout de laquelle on va changer de matériau. Autrement dit, si on se place en un point donné, la distance parcourue avant de rencontrer une interface (sortie du matériau courant) est distribuée en exponentielle.

À partir de ce paramètre on peut définir la fraction volumique de chacun des deux matériaux, de la façon suivante :

$$\mathcal{P}_\alpha = \frac{\lambda_\alpha}{\lambda_\alpha + \lambda_\beta} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_\beta = \frac{\lambda_\beta}{\lambda_\alpha + \lambda_\beta} = 1 - \mathcal{P}_\alpha$$

On peut alors définir une v.a. notée M , fonction d'un v.a. de Bernoulli, modélisant le type de matériau. Ainsi on a en tout point du milieu : $\mathbb{P}(M = \alpha) = \mathcal{P}_\alpha$ et $\mathbb{P}(M = \beta) = 1 - \mathcal{P}_\alpha$. Par abus de notation on notera : $\mathbb{P}(\alpha) = \mathcal{P}_\alpha$ et $\mathbb{P}(\beta) = 1 - \mathcal{P}_\alpha$.

À partir de ces données, on peut définir la procédure d'échantillonnage suivante pour générer une réalisation du milieu : on commence l'échantillonnage au début du slab, en tirant aléatoirement M . Supposons que l'on tire le matériau α . Ensuite on échantillonne la distance avec la prochaine interface, avec une exponentielle de paramètre λ_α . Sur toute cette distance on considère que le matériau est α . Ensuite on échantillonne une distance, avec la prochaine interface, avec une exponentielle de paramètre λ_β et ainsi de suite. La Figure 8 illustre des échantillons de slabs pour différentes valeurs de λ_α et λ_β .

A partir de ces propriétés on peut définir une autre propriété qui va être très importante dans le couplage en collision nulle, appelée la longueur de corrélation λ_c :

$$\frac{1}{\lambda_c} = \frac{1}{\lambda_\alpha} + \frac{1}{\lambda_\beta}$$

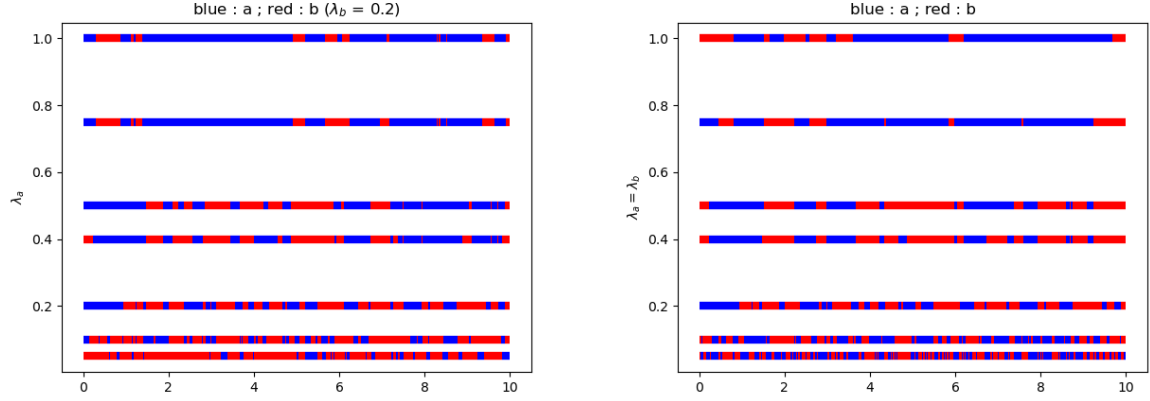


FIGURE 8 – On observe sur ces figures des échantillons de slabs markoviens, pour différentes propriétés du milieu, avec le matériau α en bleu et β en rouge, pour différentes valeurs de λ_α en fonction de l'axe des ordonnées. A gauche la valeur de λ_β est fixée à 0.2 donc c'est la fraction qui change, et à droite la valeur de λ_β est égale à λ_α donc la fraction vaut toujours 0.5.

Comme les λ_α et λ_β étaient des longueurs moyennes, leurs inverses sont des fréquences d'évènement (nombre d'interface rencontrée par unité de longueur) et donc on peut voir dans la définition de λ_c qu'elle correspond à une fréquence d'évènement qui est la somme des évènements interface α et β et c'est donc le nombre d'interfaces total. On définit une v.a. suivant une loi exponentielle de paramètre $\lambda_c = \frac{\lambda_\alpha \lambda_\beta}{\lambda_\alpha + \lambda_\beta}$ modélisant la distance avant de rencontrer une pseudo-interface, qui est une interface à laquelle on ne change pas forcément de matériau. Pour illustrer cette idée, donnons la procédure d'échantillonnage associée. Au début du slab du slab on échantillonne le matériau, à fraction de α et β . Puis on tire une pseudo-interface selon une loi exponentielle de paramètre λ_c . Sur la distance parcourue, le matériau est celui tiré au point de départ. On se place ensuite au nouveau point, situé à la distance tirée du point de départ, où l'on va à nouveau échantillonner le matériau, à fraction de α et β . Puis on recommence. On tire une distance selon l'exponentielle de λ_c , puis un nouveau matériau et ainsi de suite. Si l'on tire deux fois de suite le même matériau on traverse une pseudo-interface mais l'on ne change pas de matériau, d'où son nom. On appelle pseudo-cellule le segment entre deux interfaces. On peut avoir des pseudo-cellules adjacentes qui contiennent le même matériau.

Vu et Olson proposent une lecture de cette caractérisation du milieu markovien, pour coupler avec l'ETR en collision nulle. L'idée est de travailler à partir de la distance échantillonnée entre deux collisions lors de l'ETR, et d'exprimer la probabilité d'être dans α ou β sachant le matériau échantillonné au lieu de la collision précédente. Pour cela Vu et Olson travaillent sur des probabilités de transition. En effet, le nombre de pseudo-interface, le long d'un segment de taille r , est distribué selon une loi de Poisson de paramètre r/λ_c . Autrement dit, si on définit I comme la v.a. modélisant le nombre de pseudo-interface le long de r , on a

$$\forall k \in \mathbb{N} \quad \mathbb{P}(I = k) = e^{-r/\lambda_c} \frac{(r/\lambda_c)^k}{k!}.$$

On en déduit que la probabilité de ne pas avoir de pseudo-interface sur une distance r est e^{-r/λ_c} . L'évènement complémentaire est : avoir rencontré au moins une pseudo-interface sur une distance r , sa probabilité vaut donc $(1 - e^{-r/\lambda_c})$.

Ce formalisme permet la construction d'un nouveau jeu de probabilités. Ainsi la probabilité que deux points x et x' séparés d'une distance r_1 soient tous deux dans α est la somme des probabilités de deux évènements possibles :

1. x est dans α et on a pas rencontré de pseudo interface le long du segment de longueur r_1 ,
2. x est dans α , et on a rencontré au moins une pseudo-interface le long du segment r_1 , et la nouvelle pseudo-cellule dans lequel est x' est également remplie du matériau α ,

Ainsi, comme la probabilité d'être dans α pour une nouvelle pseudo-cellule est indépendante de savoir si

on était dans α dans une autre pseudo-cellule et vaut $\mathcal{P}_\alpha$, on a

$$\mathbb{P}(\alpha, \alpha \mid r = r_1) = \underbrace{\mathcal{P}_\alpha e^{-r_1/\lambda_c}}_{1.} + \underbrace{\mathcal{P}_\alpha (1 - e^{-r_1/\lambda_c}) \mathcal{P}_\alpha}_{2.}$$

De la même façon on détermine les probabilités suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\beta, \beta \mid r = r_1) = & \\ & (1 - \mathcal{P}_\alpha) e^{-r_1/\lambda_c} \quad (x \text{ est dans } \beta \text{ et on a pas rencontré de pseudo-interface}) \\ & + (1 - \mathcal{P}_\alpha)^2 (1 - e^{-r_1/\lambda_c}) \quad (x \text{ est dans } \beta \text{ et on a rencontré au moins une pseudo-interface et } x' \text{ est dans } \beta) \end{aligned}$$

$$\mathbb{P}(\alpha, \beta \mid r = r_1) = \mathcal{P}_\alpha (1 - e^{-r_1/\lambda_c}) (1 - \mathcal{P}_\beta) \quad (x \text{ est dans } \alpha \text{ et on a rencontré au moins une pseudo-interface et } x' \text{ est dans } \beta)$$

De ces probabilités on peut déduire la probabilité d'être dans α sachant le matériau au point de collision précédent et la distance qui les sépare. Pour cela on a besoin de la formule de Bayes que l'on rappelle ci-dessous.

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(B|A)\mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(B)}$$

On définit également $\kappa = \alpha$ ou β , on peut alors écrire la probabilité d'être dans α sachant qu'on était dans α au point précédent, séparé d'une distance r_1 de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\alpha, \alpha \mid \alpha, \kappa) &= \frac{\mathbb{P}(\alpha, \kappa \mid \alpha, \alpha) \times \mathbb{P}(\alpha, \alpha)}{\mathbb{P}(\alpha, \kappa)} = \frac{1 \times \mathbb{P}(\alpha, \alpha)}{\mathbb{P}(\alpha)} \\ &= \frac{\mathcal{P}_\alpha e_1 + \mathcal{P}_\alpha^2 (1 - e_1)}{\mathcal{P}_\alpha} = e_1 + \mathcal{P}_\alpha (1 - e_1) \quad \text{avec } e_1 = e^{-r_1/\lambda_c} \end{aligned}$$

On peut aussi calculer la probabilité d'être dans α sachant qu'on était dans β au point précédent, séparé d'une distance r_1 :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\beta, \alpha \mid \beta, \kappa) &= \frac{\mathbb{P}(\beta, \kappa \mid \beta, \alpha) \times \mathbb{P}(\beta, \alpha)}{\mathbb{P}(\beta, \kappa)} = \frac{1 \times \mathbb{P}(\alpha, \beta)}{\mathbb{P}(\beta)} \\ &= \frac{(1 - \mathcal{P}_\alpha)(1 - e_1)\mathcal{P}_\alpha}{1 - \mathcal{P}_\alpha} = (1 - e_1)\mathcal{P}_\alpha \end{aligned}$$

Grâce à ce jeu de probabilités, on peut échantillonner le matériau en un point donné, situé à une distance r de la collision précédente dont on sait dans quel matériau elle a eu lieu. Nous avons donc toutes les informations nécessaires pour réaliser le couplage entre ETR et milieu markovien à statistique homogène sans diffusion.

Après avoir implémenté la résolution de ce modèle par les méthodes de Monte Carlo, nous avons calculé numériquement le nombre de collision pour atteindre une erreur relative de 1% grâce à l'équation (5). Nous avons tracé ces résultats, en choisissant le milieu β comme transparent (fréquence de collision égal à zéro). Sur la Figure 9 nous constatons que les résultats sont semblables à ceux du slab homogène : la résolution en mode sakado est beaucoup plus rapide qu'en mode proba.

5.1.3 Construction et caractérisation des estimateurs pour un slab markovien avec diffusion

Ajouter la diffusion dans ce modèle n'est pas une mince affaire, puisque cela implique que certains photons pourraient revenir en arrière. Il faut donc être en mesure d'exprimer la probabilité d'être dans α ou β , conditionnée non plus par le matériau échantillonné lors de la dernière collision, mais par les deux points les plus proches, à gauche et à droite. Cette proposition est également travaillée par Vu et Olson. La logique pour construire les probabilités à trois points est la même que celle que nous avons utilisée pour construire les probabilités à deux points. On commence par établir la probabilité de la succession des trois matériaux, puis on établit la probabilité conditionnelle associée en utilisant la formule de Bayes.

Prenons un exemple, on cherche à calculer la probabilité d'être dans α , sachant que la plus proche collision à gauche a eu lieu dans α , à une distance r_1 et la collision la plus proche à droite a eu lieu dans α , à une distance r_2 . Pour simplifier l'écriture on définit $e_i = \exp(-\frac{r_i}{\lambda_c})$. Commençons par calculer la probabilité de la succession α, α, α . C'est la somme des probabilités de tous les événements menant à cette configuration.

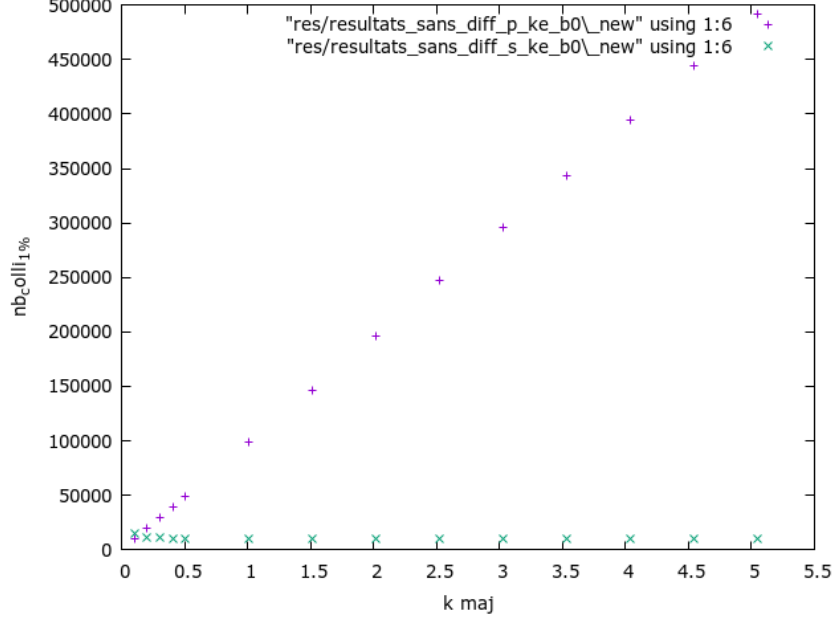


FIGURE 9 – On peut observer sur cette figure $nb_colli_1\%$ en fonction de $\hat{k}$ pour la résolution de l'ETR en collision nulle sans diffusion, en violet en mode proba et en vert en mode sakado. Pour de faibles valeurs de $\hat{k}$, les observations pour les types de résolutions sont semblables mais lorsque $\hat{k}$ augmente, les observations en mode proba augmente beaucoup alors que celles en mode sakado restent plutôt stable voir diminuent légèrement.

1. Être dans α ($\mathcal{P}_\alpha$) et ne pas rencontrer de pseudo-interface le long de la distance $r_1 + r_2$ ($e_1 \times e_2$), c'est à dire on reste dans la même pseudo-cellule.
2. Être dans α , rencontrer au moins une pseudo-interface le long de la distance r_1 ($1 - e_1$) et être à nouveau dans α , puis ne pas rencontrer de pseudo-interfaces le long de la distance r_2 (e_2).
3. Être dans α ne pas rencontrer de pseudo-interface le long de la distance r_1 (e_1), puis rencontrer au moins une pseudo-interface le long de la distance r_2 ($1 - e_2$) et être à nouveau dans α .
4. Être dans α , rencontrer au moins une pseudo-interface le long de la distance r_1 , être à nouveau dans α , puis rencontrer au moins une pseudo-interface le long de la distance r_2 et être à nouveau dans α .

On a ainsi

$$\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha) = \underbrace{\mathcal{P}_\alpha e_1 e_2}_1 + \underbrace{\mathcal{P}_\alpha (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha e_2}_2 + \underbrace{\mathcal{P}_\alpha e_1 (1 - e_2) \mathcal{P}_\alpha}_3 + \underbrace{\mathcal{P}_\alpha (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha (1 - e_2) \mathcal{P}_\alpha}_4$$

On utilise ensuite la formule de Bayes :

$$\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha \mid \alpha, \kappa, \alpha) = \frac{\mathbb{P}(\alpha, \kappa, \alpha \mid \alpha, \alpha, \alpha) \times \mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha)}{\mathbb{P}(\alpha, \kappa, \alpha)} = \frac{\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha)}{\mathbb{P}(\alpha, \alpha \mid r = r_1 + r_2)}$$

On obtient donc :

$$\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha \mid \alpha, \kappa, \alpha) = \frac{\mathcal{P}_\alpha e_1 e_2 + \mathcal{P}_\alpha (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha e_2 + \mathcal{P}_\alpha e_1 (1 - e_2) \mathcal{P}_\alpha + \mathcal{P}_\alpha (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha (1 - e_2) \mathcal{P}_\alpha}{\mathcal{P}_\alpha e + \mathcal{P}_\alpha (1 - e) \mathcal{P}_\alpha}$$

Et en suivant le même raisonnement on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\beta, \alpha, \alpha \mid \beta, \kappa, \alpha) &= \frac{\mathcal{P}_\beta (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha e_2 + \mathcal{P}_\beta (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha (1 - e_2) \mathcal{P}_\alpha}{\mathcal{P}_\beta (1 - e) \mathcal{P}_\alpha} \\ &= \frac{(1 - \mathcal{P}_\alpha) (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha e_2 + (1 - \mathcal{P}_\alpha) (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha (1 - e_2) \mathcal{P}_\alpha}{(1 - \mathcal{P}_\alpha) (1 - e) \mathcal{P}_\alpha} \end{aligned}$$

et

$$\mathbb{P}(\beta, \alpha, \beta \mid \beta, \kappa, \beta) = \frac{\mathcal{P}_\beta(1 - e_1)\mathcal{P}_\alpha(1 - e_2)\mathcal{P}_\beta}{\mathcal{P}_\beta e + \mathcal{P}_\beta(1 - e)\mathcal{P}_\beta} = \frac{(1 - \mathcal{P}_\alpha)(1 - e_1)\mathcal{P}_\alpha(1 - e_2)(1 - \mathcal{P}_\alpha)}{(1 - \mathcal{P}_\alpha)e + (1 - \mathcal{P}_\alpha)(1 - e)(1 - \mathcal{P}_\alpha)}$$

Grâce à ce jeu de probabilités dits “à trois points”, nous sommes à présent en mesure d’établir le modèle de couplage de l’ETR en collision nulle dans un milieu markovien à statistique homogène.

En ce qui concerne l’implémentation de la résolution du modèle, il va falloir, pour calculer les probabilités conditionnelles, chercher quelles sont les collisions voisines grâce à leur position et également connaître le matériau associé. Pour cela, il est nécessaire de garder en mémoire la position de chaque collision et le matériau dans lequel elle a eu lieu. Ici, en terme de coût de calcul, l’opérateur de collision n’est donc plus indépendant de la procédure d’échantillonnage. Dans ce cas, les méthodes de Monte Carlo ne conservent plus les propriétés de passage à l’échelle travaillées par EDStar. Cela ouvre une question de recherche informatique sur la gestion de la donnée, pour rendre la procédure d’échantillonnage et donc le résolution du problème indépendante de la complexité du milieu.

Pour étudier la différence de performance du temps de calcul entre les méthodes proba et sakado, nous allons étudier le nombre de collisions nécessaires pour atteindre une erreur relative de 1%, même si nous savons que pour le moment cette grandeur n’est pas ici proportionnelle au temps de calcul. Nous faisons cela pour nous donner une idée de ce que pourrait donner les méthodes de Monte Carlo dans le cas où le modèle serait optimisé du point de vue informatique. Nous avons donc tracé dans la Figure 10 $nb_colli_{1\%}$ en fonction de $\hat{k}$. Nous constatons à nouveau que les résultats sont semblables à ceux du slab homogène, c’est à dire que le nombre de collisions pour atteindre une erreur relative de 1% augmente pour les deux types d’estimateurs, mais moins vite en mode sakado qu’en mode proba. On peut dire que tant que le temps de calcul sera dépendant du nombre de collisions à stocker et trier le long du chemin, et vu que la différence entre proba et sakado reste faible en présence de diffusion, on préférera sans doute un estimateur qui demande plus de chemins mais avec moins de collisions (mode proba) que l’inverse.

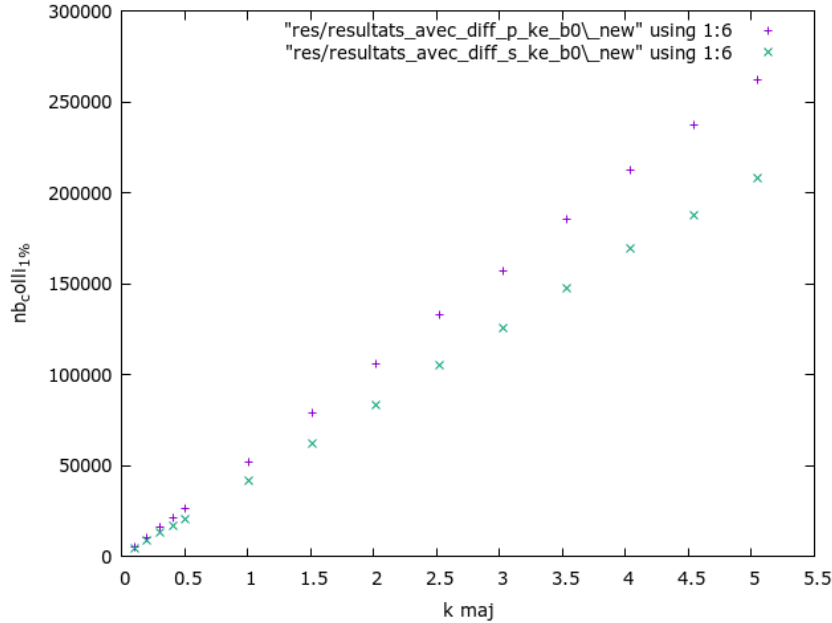


FIGURE 10 – On peut observer sur cette figure $nb_colli_{1\%}$ en fonction de $\hat{k}$ pour la résolution de l’ETR en collision nulle avec diffusion, en violet en mode proba et en vert en mode sakado. On observe, dans les deux cas un comportement semblable : $nb_colli_{1\%}$ augmente en fonction de $\hat{k}$, mais plus rapidement en mode en mode proba qu’en mode sakado.

5.2 Etude du biais de discrétisation du milieu Markovien à statistique non homogène

Dans cette partie nous allons étendre le modèle de couplage de Vu et Olson pour que notre modèle réponde aux attentes de la communauté Dephy. Notamment il faut pouvoir tenir compte du fait que

la fraction du milieu contenant du matériau α (des nuages) n'est pas constante dans l'atmosphère, elle varie en fonction de l'altitude. Cela revient à dire que les statistiques du milieu Markovien ne sont pas homogènes. Nous rappelons que dans la communauté atmosphérique, des études suggèrent que la géométrie des nuages peut-être modélisée par des milieux markoviens à statistiques non homogène (voir le chapitre 7 du livre 3D Radiative Transfer in Cloudy Atmospheres [2]).

Nous avons travaillé dans la partie précédente les milieux markoviens avec un formalisme proposé par des membres de la communauté des milieux stochastiques, pour résoudre un modèle couplé par les méthodes de Monte Carlo. L'enjeu de cette partie est d'expliquer comment, en retravaillant la proposition faite par Raphaël Lebrun dans sa thèse, nous avons établi un lien entre ce travail sur les milieux markoviens et les modèles d'overlap qui finalement nous a permis d'étendre le modèle de Vu et Olson aux milieux markoviens à statistiques non homogène.

5.2.1 Établir un lien entre milieux markoviens et le modèle d'overlap

Pour rappel, dans la Figure 5, nous avons défini des formules d'overlap qui correspondent au "recouvrement" de matériaux sur deux couches étudiées. Raphaël Lebrun, pour échantillonner le matériau des différentes mailles de son modèle (sous couches du GCM), établit des formules de probabilités conditionnelles à partir des formules d'overlap. Il peut ainsi échantillonner le matériau d'une couche en connaissant le matériau de la couche précédente. Commençons par rappeler les formules d'overlap :

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 1) = e \times \min(a_k, a_{k-1}) + (1 - e) \times a_k a_{k-1}$$

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 0) = e \times [\max(a_k, a_{k-1}) - a_{k-1}] + (1 - e) \times a_k (1 - a_{k-1})$$

En utilisant la formule de probabilité conditionnelle ($\mathbb{P}(A|B) = \mathbb{P}(A \cap B)/\mathbb{P}(B)$), on obtient le jeu de probabilités suivantes :

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \mid C_{k-1} = 1) = \frac{e \times \min(a_k, a_{k-1}) + (1 - e) \times a_k a_{k-1}}{a_{k-1}}$$

et

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \mid C_{k-1} = 0) = \frac{e \times [\max(a_k, a_{k-1}) - a_{k-1}] + (1 - e) \times a_k (1 - a_{k-1})}{1 - a_{k-1}}$$

Pour établir le lien entre ce modèle et le modèle de milieu markovien de Vu et Olson plaçons nous, dans un premier temps, dans la même configuration, i.e. dans un milieu à statistique homogène. On a donc $a_k = a_{k-1} = a$. Simplifions les formules précédentes :

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \mid C_{k-1} = 1) = \frac{e \times a + (1 - e) \times a^2}{a} = e + (1 - e)a$$

et

$$\mathbb{P}(C_k = 1 \mid C_{k-1} = 0) = \frac{(1 - e) \times a(1 - a)}{1 - a} = (1 - e) \times a$$

Rappelons à présent les formules de probabilités à deux points du modèle de Vu et Olson.

$$\mathbb{P}(\alpha, \alpha \mid \alpha, \kappa) = e_1 + \mathcal{P}_\alpha(1 - e_1) \quad \text{et} \quad \mathbb{P}(\beta, \alpha \mid \beta, \kappa) = (1 - e_1)\mathcal{P}_\alpha.$$

Formulé ainsi, le lien entre les deux modèles saute aux yeux. Il y a pourtant une différence majeure, le modèle d'overlap est discret alors que le modèle de milieux markovien est continu. La différence se trouve dans l'exponentielle : e^{r/λ_c} . Dans le modèle d'overlap la distance r représente la distance entre deux couches indicées k et $k - 1$, alors que dans le modèle couplé ETR / milieu markovien, r représente la distance entre deux collisions. Comme nous cherchons à établir un modèle continu, nous préférons garder le formalisme de Vu et Olson, mais il est important de noter que les images mentales apportées par le modèle discret d'overlap vont être essentielles pour étendre le modèle aux milieux markoviens à statistiques non homogènes.

En effet, même si ces équations sont équivalentes, l'imaginaire autour n'a rien à voir. Reprenons la lecture de ces équations avec les deux points de vue pour tenter de construire un imaginaire commun.

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\alpha, \alpha \mid r = r_1) &= \mathcal{P}_\alpha e_1 && \text{être dans } \alpha \text{ et ne pas rencontrer de pseudo-interface} \\ &+ \mathcal{P}_\alpha (1 - e_1) \mathcal{P}_\alpha && \text{être dans } \alpha, \text{ rencontrer au moins une pseudo-interface et être à nouveau dans } \alpha \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(C_k = 1 \cap C_{k-1} = 1) &= e \min(a_k, a_{k-1}) && \text{être parfaitement empilé fois le recouvrement} \\ &+ (1 - e) \times a_k a_{k-1} && \text{être décorrélé et être dans un nuage dans les couches } k-1 \text{ et } k\end{aligned}$$

Dans le cas où les fractions nuageuse a_k et a_{k-1} sont égales i.e. la statistique du milieu est homogène, “être parfaitement empilé” est synonyme de “ne pas rencontrer de pseudo interface”. En opposition, “être décorrélé” est synonyme d’ “avoir rencontré au moins une pseudo interface”, c’est à dire d’indépendance. Dans le cas où les fractions diffèrent, dans les formules, la fraction du matériau α pour les milieux markoviens, notée $\mathcal{P}_\alpha$, est remplacée par $\min(a_k, a_{k-1})$ dans le modèle d’overlap, qui est le recouvrement nuageux des deux couches.

Ce terme permet de prendre en compte que même s’il n’y a pas eu de pseudo-interface, une transition peu être “forcée” par le changement de couches et donc de fraction nuageuse. Prenons un exemple où l’on a échantillonné du nuage dans la couche $k-1$ et où la fraction nuageuse est nulle dans la couche k . Même si on n’a pas rencontré de pseudo interface ou autrement dit, si on est parfaitement empilé, le nouveau point échantillonné est obligatoirement dans du ciel clair. La transition est comme forcée par le fait qu’il n’y a pas de nuage dans la couche k et cela ce traduit dans le modèle d’overlap par $\min(a_k, a_{k-1}) = 0$. En quelque sorte, on peut appliquer le formalisme du milieu markovien, à condition de respecter, en premier lieu, les fraction nuageuses données dans les couches du GCM. Ce forçage se fait grâce aux formules d’overlap, traduisant le recouvrement entre les couches.

Pour étendre le modèle de Vu et Olson il nous faut, grâce à ce nouvel imaginaire, reconstruire les probabilités à trois points comme dans la section 5.2.1, mais pour des milieux markoviens à statistique non homogène. Reprenons le même exemple et construisons la probabilité que trois points soient tous dans un matériau α . Pour cela, on somme les probabilités des événements menant à la configuration voulue. Les trois points sont à des positions x_{j-1} , x_j et x_{j+1} qui peuvent être dans n’importe quelles couches du GCM, et on notera a_{j-1} la fraction nuageuse de la couche dans laquelle est x_{j-1} et respectivement pour j et $j+1$, sachant que les couches $j-1$, j et $j+1$ peuvent être la même couche ou non.

- (1) Ne pas rencontrer de pseudo-interface le long de $r_1 + r_2$ et être dans l’overlap des couches $j-1$, j et $j+1$.
- (2) Être dans un nuage au point x_{j-1} , rencontrer au moins une pseudo-interface le long de r_1 , être à nouveau dans un nuage au point x_j , rencontrer au moins une pseudo-interface le long de r_2 et être à nouveau dans un nuage au point x_{j+1} .
- (3) Être dans l’overlap des couches $j-1$ et j , ne pas rencontrer de pseudo-interface le long de r_1 , rencontrer au moins une pseudo-interface le long de r_2 et être dans un nuage au point x_{j+1} .
- (4) Être dans un nuage au point x_{j-1} , rencontrer au moins une pseudo-interface le long de r_1 , être dans l’overlap des couches j et $j+1$ et ne pas rencontrer de pseudo-interface le long de r_2 .

$$\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha) = [\min(a_{j-1}, a_j, a_{j+1})]e_1e_2 \quad (1)$$

$$+ a_{j-1}(1 - e_1)a_j(1 - e_2)a_{j+1} \quad (2)$$

$$+ \min(a_{j-1}, a_j)e_1(1 - e_2)a_{j+1} \quad (3)$$

$$+ a_{j-1}(1 - e_1)\min(a_j, a_{j+1})e_2 \quad (4)$$

En suivant la même démarche on peut construire toute les probas à trois points :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \beta) &= [\max(a_{j+1}, \min(a_j, a_{j-1}) - a_{j+1})]e_1e_2 \\ &+ a_{j-1}(1 - e_1)a_j(1 - e_2)(1 - a_{j+1}) \\ &+ \min(a_{j-1}, a_j)e_1(1 - e_2)(1 - a_{j+1}) \\ &+ a_{j-1}(1 - e_1)\max(a_j, a_{j+1} - a_1)e_2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\alpha, \beta, \beta) &= [a_{j-1} - \min(a_{j-1}, \max(a_j, a_{j+1}))]e_1e_2 \\ &+ a_{j-1}(1 - e_1)(1 - a_j)(1 - e_2)(1 - a_{j+1}) \\ &+ [a_{j-1} - \min(a_{j-1}, a_j)e_1(1 - e_2)(1 - a_{j+1}) \\ &+ a_{j-1}(1 - e_1)[1 - \max(a_j, a_{j+1})]e_2\end{aligned}$$

Et grâce aux formules de Bayes on abouti aux probas conditionnelles :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha | \alpha, \nu, \alpha) &= \frac{\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \alpha)}{\mathbb{P}(\alpha, \alpha | r = r_1 + r_2)} \\ \mathbb{P}(\alpha, \alpha, \beta | \alpha, \nu, \beta) &= \frac{\mathbb{P}(\alpha, \alpha, \beta)}{\mathbb{P}(\alpha, \beta | r = r_1 + r_2)} \\ \mathbb{P}(\beta, \alpha, \beta | \beta, \nu, \beta) &= \frac{\mathbb{P}(\beta, \alpha, \beta)}{\mathbb{P}(\beta, \beta | r = r_1 + r_2)}\end{aligned}$$

Nous avons à présent un moyen d'échantillonner le milieu markovien à statistique non homogène, à la volée, en diffusion, et qui plus est de façon continue. Ce jeu de probabilités nous permet donc de résoudre par méthodes de Monte Carlo le modèle couplant ETR et milieux markoviens à statistique non homogène. Nous pouvons donc à présent utiliser cet estimateur et le comparer avec celui correspondant au modèle de Raphaël Lebrun.

5.2.2 Caractérisation du biais de discrétisation des milieux Markoviens

Comme on a un modèle sans biais de discrétisation, on peut comparer ses estimations aux estimations obtenues avec un modèle discrétisé pour évaluer dans quelles circonstances on a un biais ou non. On a donc fait des simulations pour différentes valeurs de fractions nuageuses, différentes valeurs de λ_c et différents niveaux de discrétisation. La Figure 11 montre les résultats, représentés pour chaque configuration. Les différentes figures correspondent à différentes fractions nuageuses : 0.1, 0.4 et un cas variant de 0.4 en bas à 0 en haut. Le comportement est à peu près le même pour ces différents cas. Pour chaque cas on a fait des simulations pour des λ_c variant de 0.001 (cas très décorrélé) à 10 (cas très corrélé). Comme le slab est de taille 10 et contient 10 couches, si on a un λ_c de 10 cela veut dire que l'overlap est quasiment maximal sur toute la colonne. Pour chacun de ces cas, on a une référence obtenue avec le modèle couplé. Et on a fait des simulations avec le modèle discrétisé, avec un découpage en sous-couche de plus en plus fin. Plus on a de sous-couches, plus la distance r entre deux couches est petite. Dans le premier cas on a une seule sous-couche ce qui revient à ne pas du tout raffiner le modèle d'overlap sur la verticale, comme c'est fait par exemple dans le modèle MCICA utilisé en atmosphère. Ensuite on a 10, 100 voire 1000 sous-couches par couches. On voit que plus on a de sous couches (c'est à dire plus la distance r est petite), plus les estimations couplées et discrétisées sont proches : le biais de discrétisation est faible et l'estimation discrétisée converge vers la solution. Par contre quand on a pas de sous-couche, on peut avoir un fort biais dans le cas où λ_c est petit. Cela correspond au cas très décorrélé. Ce qu'il se passe c'est que si on ne raffine pas le modèle d'overlap, cela revient à avoir un overlap maximal à l'intérieur des couches, alors qu'en fait il devrait être plus décorrélé selon le modèle continu. On voit donc un biais important dans les cas extrêmes quand r est très grand devant λ_c . On peut noter que Raphaël Lebrun avait utilisé son modèle discrétisé avec des sous-couches pour montrer qu'il était nécessaire de raffiner verticalement le modèle d'overlap (par rapport à MCICA) ce qui est cohérent avec ce que l'on observe ici. Et ici on a en plus quantifié le biais qui restait dans le modèle de Raphaël Lebrun du fait de la discrétisation.

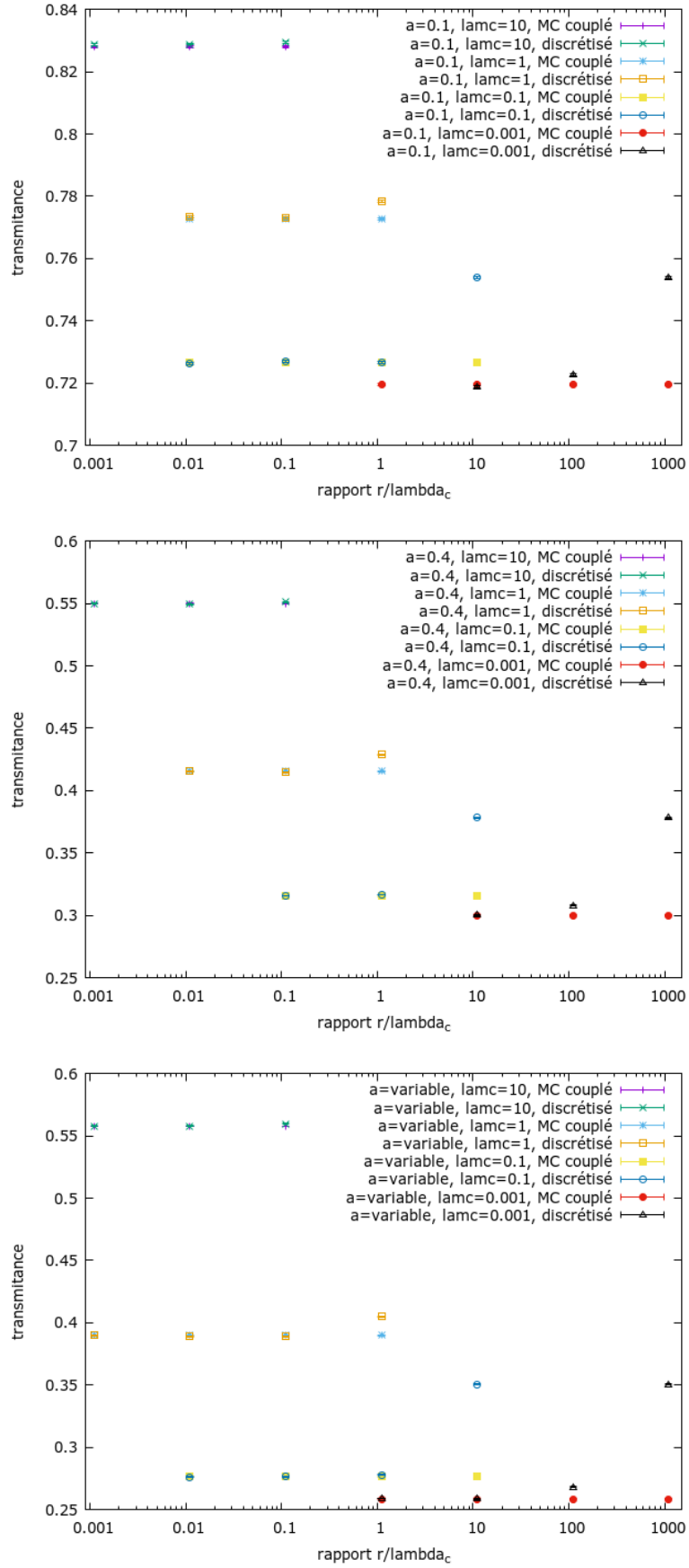


FIGURE 11 – On observe sur ces figures les estimations par Monte Carlo couplé que l'on prend comme référence, et les estimations par Monte Carlo avec discrétisation du milieu Markovien. En haut pour un milieu avec des fractions nuageuses de 0.1, au milieu de 0.4 et en bas des valeurs variant de 0.4 à 0 en fonction de l'altitude.

6 Ouverture et perspective

Le développement du modèle couplant équation de transfert radiatif et milieux markoviens à statistique non homogène a permis, pour la première fois au sein du collectif EDStar, de proposer un exemple de couplage entre l'équation cinétique et des milieux stochastiques représentant les nuages. Il existait déjà une proposition de couplage de l'ETR avec un processus stochastique représentant un milieu gazeux dans la thèse de Nada Mourtaday [12], dans un formalisme très physicien car les processus stochastiques sont bien ancrés dans la culture EDStar. Mais ici, on a eu une approche inspirée d'une autre communauté ce qui a permis de faire de nouveaux liens et de poser un nouveau regard sur ces couplages. Cette avancée offre de nombreuses perspectives et soulève de nouvelles questions de recherche.

Une première piste concerne l'extension de ce type de couplage. En effet, le formalisme proposé redéfinit l'approche du problème et ouvre la possibilité d'étendre ce couplage à d'autres types de milieux stochastiques. Une question qui est restée en suspens même si j'ai pu commencer à la traiter dans les dernières semaines de stage, est de passer à un milieu Markovien 3D. Pour cela Vu et Olson ont fait une proposition mais elle introduit un biais dans les probabilités conditionnelles. Une piste de travail qui reste donc à traiter dans la suite de mon travail sera de réfléchir à des probabilités conditionnelles sans biais pour le passage en 3D. Nous avons commencé à y travailler et cela nécessiterait peut être de sortir de l'hypothèse de milieu Markovien, pour plutôt échantillonner des processus gaussiens car là on saurait exprimer les probabilités conditionnelles tenant compte des corrélations avec tous les points. Mais on ne sait pas encore ce que ça signifierait de remplacer le processus Markovien par un processus gaussien, et si ce serait un bon modèle pour décrire la géométrie des nuages.

D'autres questions émergent de l'implémentation du modèle. Bien que nous ayons développé un modèle fonctionnel et suffisamment rapide pour être praticable sur un ordinateur normal, la propriété de passage à l'échelle des méthodes de Monte Carlo n'est pas conservée. Cela est dû au fait que l'on stocke une quantité d'information qui augmente et que l'on doit traiter à chaque collision, et les algorithmes de tri que j'ai mis en oeuvre ne sont pas optimisés. De plus on voit que la complexité de cette donnée à stocker et trier dépend du coefficient $\hat{k}$ ce qui résonne avec les travaux de thèse de Najda Villefranque dans laquelle une proposition a été d'optimiser le choix de $\hat{k}$ pour s'adapter aux hétérogénéités du champ nuageux et ainsi conserver les propriétés de passage à l'échelle. Les questions que j'ai ouvert pendant mon stage sont dans la même voie de recherche, à l'interface entre la physique du rayonnement et l'informatique, pour structurer les données pour rendre l'opération de collision indépendante de la complexité du milieu en termes de temps de calcul.

Enfin, une question clé se pose pour le collectif Dephy : la validité du modèle pour représenter les interactions nuages-rayonnement. Bien que le modèle soit correct sur le plan mathématique, sa pertinence pour décrire le rayonnement dans les nuages reste à étudier. Pour cela, une possibilité serait de réaliser un grand nombre de simulations LES (Large Eddy Simulations), c'est-à-dire des simulations détaillées de champs nuageux, afin d'étudier le rayonnement arrivant à la surface et de le comparer aux prédictions de notre modèle, ajusté aux statistiques issues des LES.

7 Conclusion personnelle

Ce stage, par la pluralité des sujets, des collectifs et des acteurs rencontrés, a été extrêmement enrichissant. J'ai eu la chance, au cours de ce stage, d'étudier des sujets très variés, allant de la compréhension des phénomènes atmosphériques à l'étude des modèles climatiques, en passant par la thermique des bâtiments ou encore la spectroscopie. Cette diversité a ravivé ma curiosité et m'a permis d'étendre ma culture scientifique.

Malgré l'étendue des sujets abordés, j'ai eu l'opportunité de me spécialiser en modélisation par les méthodes de Monte-Carlo. Ce travail m'a permis de m'approprier de nombreux outils, notamment dans le domaine des probabilités et du rayonnement atmosphérique. Je suis fière que mon investissement et mon travail aient abouti à l'élaboration de ce modèle. Parallèlement à ces apprentissages, j'ai beaucoup appris sur la question informatique, tant d'un point de vue pratique que sur l'importance de maîtriser les outils que l'on utilise. Je suis également heureuse d'avoir découvert le monde de la recherche et la variété des activités qui composent ce métier, d'avoir pu donner des cours de GNU-Linux, d'assister et de participer à des séminaires, etc. Je suis infiniment reconnaissante d'avoir rencontré de nombreux spécialistes passionnés avec qui j'ai pu travailler et construire un savoir collectif.

Pour finir, je tiens à remercier ma tutrice de stage, Najda Villefranque, avec qui j'ai adoré travailler, pour le temps et la patience qu'elle m'a accordés, pour tout ce qu'elle m'a appris, et pour m'avoir donné envie de faire de la recherche.

Annexes

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(x, \vec{\omega}) &= e^{-k_e x} \mathcal{L}_0 + \int_0^x k_e e^{-k_e(x-l)} \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^*(l) + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right] dl \\
&= e^{-k_e x} \mathcal{L}_0 + \int_0^x k_e e^{-k_e l} \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^*(x-l) + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x-l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right] dl \\
&= \int_x^{+\infty} k_e e^{-k_e l} \mathcal{L}_0 dl + \int_0^x k_e e^{-k_e l} \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^*(x-l) + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x-l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right] dl \\
&= \int_0^{+\infty} k_e e^{-k_e l} \mathcal{L}_0 \times \mathbf{H}(l > x) dl \\
&\quad + \int_0^{+\infty} \mathbf{H}(l < x) \times k_e e^{-k_e l} \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^*(x-l) + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x-l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right] dl \\
&= \int_0^{+\infty} k_e e^{-k_e l} \left\{ \mathcal{L}_0 \mathbf{H}(l > x) + \mathbf{H}(l < x) \left[(1 - ssa) \mathcal{L}^*(x-l) + ssa \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{\omega}, \vec{\omega}') \mathcal{L}(x-l, \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \right] \right\} dl
\end{aligned}$$

Calcul théorique de la variance

- **Proba** Pour calculer la variance de Y en mode proba, reprenons la fomule de la variance :

$$Var(Y) = \mathbb{E}[Y^2] - \mathbb{E}[Y]^2$$

On rappel que pour une variable aléatoire discrète X avec $X(\Omega) = \{x_k\}_{k \in I}$ on a :

$$\mathbb{E}[X] = \sum_{k \in I} x_k \times \mathbb{P}(X = x_k)$$

Dans notre cas, ici $Y(\Omega) = \{0, 1\}$, ainsi on a que $\mathbb{E}[Y^2] = \mathbb{E}[Y]$, on a donc :

$$\begin{aligned}
Var(Y) &= \mathbb{E}[Y] \times (1 - \mathbb{E}[Y]) \\
&= e^{-kH} (1 - e^{-kH})
\end{aligned}$$

- **Sakado**

Pour calculer la variance en mode sakado, on pose que $\mathcal{L}(x) = \mathbb{E}[Y]$ avec $Y = (1 - \frac{k}{\hat{k}})^N$, où N est la variable aléatoire modélisant le nombre de collisions le long d'un chemin à travers un slab. Comme les distances entre les collisions le long du slab est distribuées en exponentielle, on sait que N suit une loi de Poisson de paramètre la longueur du slab fois la fréquence de collision. Ainsi,

$$N(\Omega) = \mathbb{N}, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad \mathbb{P}(N = n) = \frac{(\hat{k}H)^n}{n!} e^{-\hat{k}H}$$

Grâce à cette formule on peut calculer la variance de Y

$$Var(Y) = \mathbb{E}[Y^2] - \mathbb{E}[Y]^2$$

Commençons par calculer $\mathbb{E}[Y^2]$

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[Y^2] &= \mathbb{E}[(1 - \frac{k}{\hat{k}})^N]^2 \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} \mathbb{P}(N = n) ((1 - \frac{k}{\hat{k}})^n)^2 \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\hat{k}H)^n}{n!} e^{-\hat{k}H} (\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}})^{2n} \\
&= e^{-\hat{k}H} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} (\hat{k}H)^n (\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}})^{2n} \\
&= e^{-\hat{k}H} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \{ \hat{k}H (\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}})^2 \}^n \\
&= e^{-\hat{k}H} \exp(\hat{k}H (\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}})^2)
\end{aligned}$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
Var(Y) &= \mathbb{E}[Y^2] - \mathbb{E}[Y]^2 \\
&= \exp(-\hat{k}H(1 - [\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}}]^2)) - \exp(-2kH) = \sigma_Y^2
\end{aligned}$$

Calcul théorique du nombre de collision pour atteindre 1% d'erreur relative

Nous cherchons ici à calculer le nombre de collisions pour atteindre une erreur relative de 1%, noté $nb_colli_{1\%}$ donné par $nb_colli_{1\%} = nb_chemin_{1\%} \times nb_colli_moyen_par_chemin$.

Commençons par calculer le $nb_chemin_{1\%}$ qui est en fait le nombre de réalisations de Y , nécessaire pour atteindre une erreur relative de 1%. C'est à dire nb_chemin tel que $\frac{\sigma_Y}{\mathbb{E}[Y]} = 0.01$. Cette equation est vrai pour les deux types de résolutions, seul l'écart type diffère. Partons de cette équation pour déterminer $nb_chemin_{1\%}$

$$\begin{aligned}
\frac{\sigma_Y}{\mathbb{E}[Y]} &= \frac{\sigma_Y}{\mathbb{E}[Y]} = 0.01 \\
\Leftrightarrow \sigma_Y &= \frac{\sigma_Y}{\sqrt{nb_chemin_{0.01}}} = 0.01 \mathbb{E}[Y] \\
\Leftrightarrow nb_chemin_{0.01} &= (\frac{\sigma_Y}{0.01 \mathbb{E}[Y]})^2 = Var(Y) \times e^{2kH} \times 10^4
\end{aligned}$$

Il nous faut ensuite calculer le nombre de collision moyen par chemin. Ce nombre est différent selon le type de résolution.

• Proba

Dans le cas de la résolution en mode proba on a que :

$$nb_colli_moyen_par_chemin = p_{source} \times \mathbb{E}[N_{source}] + p_{trav} \times \mathbb{E}[N_{trav}]$$

avec p_{source} la probabilité que le photon provienne d'un source, p_{trav} la probabilité que le photon traverse. On a donc $p_{source} = 1 - p_{trav} = 1 - e^{-kH}$. Les variables aléatoires N_{source} et N_{trav} modélisent le nombre de collisions respectivement des photons qui ramènent la source, et des photons qui traversent le slab et ramènent la condition aux limites.

Il est facile de déterminer N_{trav} puisque cette variable aléatoire est identique à la variable aléatoire N considérée en mode Sakado, i.e. N_{trav} suit une loi de Poisson de paramètre $\hat{k}H$. Ainsi $\mathbb{E}[N_{trav}] = \hat{k}H$. À présent on souhaite calculer $\mathbb{E}[N_{source}]$, c'est à dire le nombre moyen de collisions pour un photon ne traversant pas le slab. Ce nombre va évidemment dépendre de la distance parcourue par le photo

dans le slab. Cette distance est elle même modélisée par une variable aléatoire L_{source} , suivant une loi exponentielle de paramètre k .

D'un point de vu physique le nombre de collisions correspond à la fréquence de collisions multipliées par la distance parcourue par le photon, ie $N = \hat{k}L_{source}$. Attention, il faut bien noter que L_{source} est différente de la variable aléatoire L définie précédemment. En effet, cette dernière modélise la distance parcourue avant qu'il y ai collision (nulle ou réelle). En revanche L_{source} modélise la distance parcourue par un photon avant qu'il y ait une "réelle" collision. Ainsi, par le théorème du transfert on obtient :

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[N_{source}] &= \int_0^H \hat{k}l p_{L_{source}}(l)dl \quad \text{avec } p_{L_{source}} \text{ la densité de proba de } L_{source} \\
&= \int_0^H \hat{k}l \frac{ke^{-kl}}{1-e^{-kH}} dl \quad p_{L_{source}} = \frac{ke^{-kl}}{1-e^{-kH}} \text{ (loi exp normalisée sur } [0,H]) \\
&= \frac{1}{1-e^{-kH}} \int_0^H \hat{k}l ke^{-kl} dl \\
&= \frac{1}{1-e^{-kH}} ([-\hat{k}le^{-kl}]_0^H + \int_0^H \hat{k}e^{-kl} dl) \\
&= \frac{1}{1-e^{-kH}} (-\hat{k}He^{-kH} + [\frac{\hat{k}e^{-kl}}{-k}]_0^H) \\
&= \frac{1}{1-e^{-kH}} (-\hat{k}He^{-kH} - \frac{\hat{k}e^{-kH}}{k} + \frac{\hat{k}}{k}) \\
&= \frac{1}{1-e^{-kH}} (-\hat{k}He^{-kH} + \frac{\hat{k}}{k}(1-e^{-kH}))
\end{aligned}$$

D'où $p_{source} \times \mathbb{E}[N_{source}] = -\hat{k}He^{-kH} + \frac{\hat{k}}{k}(1-e^{-kH})$.

Finalement on obtient :

$$\begin{aligned}
nb_colli_moyen_par_chemin &= -\hat{k}He^{-kH} + \frac{\hat{k}}{k}(1-e^{-kH}) + \hat{k}He^{-kH} \\
&= \frac{\hat{k}}{k}(1-e^{-kH})
\end{aligned}$$

On aurait pu voir le problème autrement, en définissant le nombre de collisions moyen par chemin comme une espérance : $\mathbb{E}[N] = nb_colli_moyen_par_chemin$, avec N la variable aléatoire modélisant le nombre de collisions pour n'importe quel chemin. C'est à dire, mélangeant les chemins des photons qui traversent et les chemins des photons qui ne traversent pas. N est défini à l'aide de la variable aléatoire L_{source} de la façon suivante.

$$N = g(L_{source}) = \hat{k}L_{source} \times \mathcal{H}(H - L_{source}) + \hat{k}H \times \mathcal{H}(L_{source} - H)$$

Pour N définie ci dessus, on a, grâce au théorème du transfert :

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[N] &= \int_0^{+\infty} (\hat{k}l \times \mathcal{H}(H-l) + \hat{k}H \times \mathcal{H}(l-H)) \times p_{L_{source}}(l) dl \\
&= \int_0^H \hat{k}l ke^{-kl} dl + \int_H^{+\infty} \hat{k}H ke^{-kl} dl \\
&= -\hat{k}He^{-kH} - \frac{\hat{k}}{k}e^{-kH} + \frac{\hat{k}}{k} + \hat{k}He^{-kH} \\
&= \frac{\hat{k}}{k}(1-e^{-kH})
\end{aligned}$$

Finalement on obtient :

$$nb_colli_{0,01} = \text{Var}(Y) \times e^{2kH} \times 10^4 \times (\frac{\hat{k}}{k}(1-e^{-kH}))$$

Dit autrement,

$$nb_colli_{0.01} = e^{-kH} (1 - e^{-kH}) \times e^{2kH} \times 10^4 \times \left[\frac{\hat{k}}{k} (1 - e^{-kH}) \right]$$

- **Sakado**

Dans le cas c'est simple, on sait par definition de l'espérance de la loi de Poisson que

$$nb_colli_moyen_par_chemin = \mathbb{E}[N] = \hat{k}H$$

.

On obtient donc :

$$nb_colli_{0.01} = \text{Var}(Y) \times e^{2kH} \times 10^4 \times \hat{k}H$$

Exprimé autrement,

$$nb_colli_{0.01} = (\exp(-\hat{k}H[1 - (\frac{\hat{k} - k}{\hat{k}})^2]) - \exp(-2kH)) \times e^{2kH} \times 10^4 \times \hat{k}H$$

Références

- [1] Howard W. Barker, Graeme L. Stephens, and Qiang Fu. The sensitivity of domain-averaged solar fluxes to assumptions about cloud geometry. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 125(558) :2127–2152, 1999.
- [2] N. Byrne. *3D Radiative Transfer in Stochastic Media*, pages 385–424. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005.
- [3] J. Dauchet, J.-J. Beziau, S. Blanco, C. Caliot, J. Charon, C. Coustet, M. El Hafi, V. Eymet, O. Farges, V. Forest, R. Fournier, M. Galtier, J. Gautrais, A. Khuong, L. Pelissier, B. Piaud, M. Roger, G. Terrée, and S. Weitz. Addressing nonlinearities in Monte Carlo. *Scientific reports*, 8 :2045–2322, 2018.
- [4] Mouna El Hafi, Stephane Blanco, Jérémie Dauchet, Richard Fournier, Mathieu Galtier, Loris Ibarart, Jean-Marc Tregan, and Najda Villefranque. Three viewpoints on null-collision Monte Carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2020.
- [5] M. Galtier, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, A. Khuong, B. Piaud, and G. Terrée. Integral formulation of null-collision Monte Carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 125 :57–68, August 2013.
- [6] M. Galtier, M. Roger, F. André, and A. Delmas. A symbolic approach for the identification of radiative properties. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 196 :130–141, July 2017.
- [7] Mathieu Galtier. *A statistical approach of radiative transfer in heterogeneous and gaseous media : from molecular transitions sampling to the computation of radiative observables*. Theses, Ecole des Mines d’Albi-Carmaux, December 2014.
- [8] Mathieu Galtier, Stéphane Blanco, Jérémie Dauchet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Richard Fournier, Maxime Roger, Christophe Spiesser, and Guillaume Terrée. Radiative transfer and spectroscopic databases : A line-sampling monte carlo approach. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 172 :83 – 97, 2016. Eurotherm Conference No. 105 : Computational Thermal Radiation in Participating Media V.
- [9] Robin J. Hogan and Anthony J. Illingworth. Deriving cloud overlap statistics from radar. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 126(569) :2903–2909, October 2000.
- [10] Robin J. Hogan, Sophia A. K. Schäfer, Carolin Klinger, J. Christine Chiu, and Bernhard Mayer. Representing 3-D cloud radiation effects in two-stream schemes : 2. Matrix formulation and broadband evaluation. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 121(14) :2016JD024875, July 2016.
- [11] Raphaël Lebrun, Jean-Louis Dufresne, and Najda Villefranque. A consistent representation of cloud overlap and cloud subgrid vertical heterogeneity. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 15(6) :e2022MS003592, 2023. e2022MS003592 2022MS003592.
- [12] Nada chem’s Mourtaday. *Espaces de chemins couplés pour le calcul de sensibilités par la méthode de Monte Carlo : opérationnalité et perspectives*. PhD thesis, 2024. Thèse de doctorat dirigée par Fournier, Richard et Blanco, Stephane Mécanique des fluides, energetique, thermique, combustion, acoustique Université de Toulouse (2023-....) 2024.
- [13] Yaniss Nyffenegger-pere. *Coupler le rayonnement et la spectroscopie raie par raie dans un meme algorithme de monte carlo : Permettre le calcul de référence des forçages radiatifs*. PhD thesis, 2023. Thèse de doctorat dirigée par Fournier, Richard et Blanco, Stephane Mécanique des fluides, energetique, thermique, combustion, acoustique Toulouse 3 2023.
- [14] Yaniss Nyffenegger-Péré, Raymond Armante, Mégane Bati, Stéphane Blanco, Jean-Louis Dufresne, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Vincent Forest, Richard Fournier, Jacques Gautrais, Raphaël Lebrun, Nicolas Mellado, Nada Mourtaday, and Mathias Paulin. Spectrally refined unbiased monte carlo estimate of the earth’s global radiative cooling. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 121(5) :e2315492121, 2024.

- [15] Aaron Olson and Emily Vu. An extension of conditional point sampling to multi-dimensional transport.
- [16] Robert Pincus, Howard W. Barker, and Jean-Jacques Morcrette. A fast, flexible, approximate technique for computing radiative transfer in inhomogeneous cloud fields. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 108(D13) :n/a–n/a, July 2003.
- [17] Petri Räisänen, Howard W. Barker, Marat F. Khairoutdinov, Jiangnan Li, and David A. Randall. Stochastic generation of subgrid-scale cloudy columns for large-scale models. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 130(601) :2047–2067, 2004.
- [18] Sophia A. K. Schäfer, Robin J. Hogan, Carolin Klinger, J. Christine Chiu, and Bernhard Mayer. Representing 3-D cloud radiation effects in two-stream schemes : 1. Longwave considerations and effective cloud edge length. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 121(14) :2016JD024876, July 2016.
- [19] Jonathan K. P. Shonk and Robin J. Hogan. Tripleclouds : An Efficient Method for Representing Horizontal Cloud Inhomogeneity in 1d Radiation Schemes by Using Three Regions at Each Height. *Journal of Climate*, 21(11) :2352–2370, june 2008.
- [20] Guillaume Terrée. *Méthode de Monte-Carlo et non-linéarités : de la physique du transfert radiatif à la cinétique des gaz*. PhD thesis, 2015. Thèse de doctorat dirigée par El Hafi, Mouna et Maréchal, Pierre Energétique et transferts Ecole nationale des Mines d’Albi-Carmaux 2015.
- [21] Jean-Marc Tregan. *Thermique non-linéaire et Monte-Carlo*. Theses, Université Toulouse 3 Paul Sabatier, December 2020.
- [22] Najda Villefranque, Frédéric Hourdin, Louis d’Alençon, Stéphane Blanco, Olivier Boucher, Cyril Caillot, Christophe Coustet, Jérémie Dauchet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Olivier Farges, Vincent Forest, Richard Fournier, Jacques Gautrais, Valéry Masson, Benjamin Piaud, and Robert Schoetter. The “teapot in a city” : A paradigm shift in urban climate modeling. *Science Advances*, 8(27) :eabp8934, 2022.
- [23] Emily H. Vu and Aaron J. Olson. Conditional point sampling : A stochastic media transport algorithm with full geometric sampling memory. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 272 :107767, 2021.