

Formuler la Physique en Espace de Chemins pour aborder la question de la complexité géométrique

March 21, 2019

Consortium EDSTAR

http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/prod/fr/

Abstract

Les travaux réalisés ces dernières années en physique au contact de la communauté de l'informatique graphique permettent de proposer des issues en terme calculatoire et d'analyse dans les situations où les méthodes numériques de résolution en champs trouvent leurs limites face à la croissance des complexités géométriques et phénoménologiques. La proposition qui s'appuie sur la capacité à reformuler les corpus de la physique en intégrale de chemins et à les balayer statistiquement est présentée et illustrée au travers de questions relevant de la physique des transferts thermiques.

Un point d'ancrage

Créer une image de synthèse d'une scène consiste à simuler la perception visuelle qu'aurait un individu étant donné un jeu d'éclairage prescrit et sa position d'observation. En informatique graphique assurer le meilleur rendu visuel consiste à produire des algorithmes "performants" sur des scènes géométriques du plus grand niveau de finesse possible. Originellement la pratique consistait à proposer des algorithmes inspirés de la physique de la propagation de la lumière auquel on ajoutait quelques heuristiques artistiques pour assurer un rendu "photo-réaliste". La donnée pouvait être d'un niveau de raffinement élevé sans pour autant que les images produites ne soient totalement satisfaisantes pour l'oeil expert de l'observateur. Ainsi, au delà des performances calculatoires, la question de la capacité des modèles à décrire les effets visuels les plus subtils s'est posée comme un élément central de réflexion pour toute cette communauté.

Dans ce contexte deux idées essentielles récentes ont remanié le paysage de la synthèse d'image en terme de recherche et développement :

- Le niveau de performance des modèles requis pour assurer la qualité visuelle au niveau de la prétention actuelle en terme de réalisme ne peut être obtenue qu'à partir du moment où les principes de la physique sont entièrement respectés. C'est l'émergence du concept de Rendu Physiquement Réaliste ("Physically Based Rendering" en anglais) [1, 2]. Il ne s'agit plus de simplement s'inspirer des modèles de la physique, il y a nécessité à assurer avec précision les propositions des corpus théoriques de la physique de l'interaction lumière/matière.
- Pour que le point précédent puisse être mis en oeuvre informatiquement sur des scènes extrêmement détaillées, il est nécessaire de se tourner vers les méthodes d'intégration statistique de type Monte Carlo [3]. Ces méthodes sont les seules à ne pas s'effondrer du point de vue calculatoire lorsque l'on fait croître la complexité phénoménologique et géométrique, nul besoin alors de concession sur les modèles. Le sacrifice d'une résolution déterministe au profit du point de vue statistique n'est en aucun cas un sacrifice sur la précision de résultat.

L'industrie du cinéma face à sa question de la production des images de synthèse est depuis peu entièrement acquise à ce paradigme [4], entraînant dans son sillage les évolutions "hardwares" à couvrir et à anticiper ces besoins de calcul intensif tout à fait spécifiques.



Figure 1: **Images construites statistiquement.** Ces deux images sont celles mises en avant dans le livre PBRT [1]. Chaque élément géométrique de cette scène (brin d’herbe, feuille) est décrit dans tous ses détails, à la fois géométriques et de texture, et l’image est physiquement réaliste en ce sens qu’elle résulte de la résolution exacte du transfert de rayonnement depuis le soleil vers l’oeil de l’observateur au travers de ces milliers de réflecteurs. La méthode de calcul étant statistique, sa convergence dépend du nombre de réalisations aléatoires (nombre de chemins de réflexion multiple). L’image de gauche est convergée, alors que celle de droite est construite à l’aide d’un nombre de réalisations insuffisant.

Un besoin similaire

Le tour de force de la synthèse d’image n’est pas purement de nature informatique (au sens de la capacité à traiter la donnée), les travaux qui ont amenés à ce niveau de performance sont partagés dans une histoire commune avec les sciences physiques et les mathématiques appliquées. Le résultat apparaît cependant comme singulier au sens de la praticabilité. Il en est en effet peu courant de rencontrer une chaîne méthodologique permettant de résoudre numériquement un modèle de la physique non dégradé en assurant une quasi-insensibilité calculatoire à la complexité de la représentation géométrique. Ce paradigme a été nommé dans cette communauté par l’aphorisme ”Teapot in a Stadium” (voir par exemple [5]), signifiant qu’il est possible d’imager dans une infinie finesse un objet même si celui-ci n’est qu’un minuscule élément de la scène étudiée.

La singularité de cette réussite apparaît comme un divers de propositions et de choix, de particularités et d’opportunités, dont on peut imaginer que la reproduction dans un contexte différent soit délicat. Pour autant, les besoins applicatifs dans d’innombrables champs des sciences expérimentales font état d’un besoin équivalent et la quête du toujours plus fin et toujours plus complexe est au coeur de la pratique. La proposition que nous illustrons dans ce papier s’inscrit dans cette pratique en soutenant l’idée que la physique du transfert radiatif n’est pas la seule à rentrer dans ce cadre et que le bénéfice d’une nouvelle lecture des problèmes peut permettre de lever des verrous d’ordre calculatoire, interprétatifs ou analytiques.

Linéarité, Espace de chemin et Description Statistique

La physique de l’interaction de la lumière avec la matière décrite en synthèse d’image s’appuie essentiellement sur le cadre de la théorie linéaire du transport des photons, théorie elle-même dérivée des propositions de Boltzmann sur la représentation des systèmes particuliers en interactions réciproques ou avec une matière extérieure. Cette physique présente l’avantage d’être construite avec une pensée propagative et un point de vue statistique sur le comportement de la lumière. Bien que déterministe dans son énoncé (puisqu’on s’intéresse aux probabilités), la proposition de Boltzmann est ancrée dans une représentation statistique et s’adapte parfaitement à une formulation en suivi de chemins aléatoires. Ainsi on peut suivre par la pensée l’histoire des photons dans la scène qui vont des sources aux récepteurs en empruntant des chemins qui se construisent aléatoirement à chaque interaction.

On distingue dans cette proposition trois éléments de nature différentes eu égard aux classifications usuelles des modèles de la physique :

- Le modèle proposé pour la description de l’interaction de la lumière avec son environnement est linéaire

au sens du principe de superposition : les effets des "solllicitations" sur une observable se somme directement. La linéarité des modèles se traduit très généralement par l'existence d'une pensée propagative : une des formulations les plus aboutie de cette idée est initiée par Georges Green au début du XIXeme siècle et fondamentalement solidifiée au XXeme par la théorie des distributions en mathématiques (Laurent Schwartz). Richard Feynman, au milieu du XXeme propose, à l'occasion de sa reformulation de l'électrodynamique quantique, de nommer l'idée centrale dans le formalisme de Green [6]: le propagateur devient du point de vue formel l'objet quasi incontournable pour penser la physique du linéaire.

- Assez naturellement pour la description du comportement de la lumière apparaît l'idée que la contribution des sources au visuel de l'observateur est à comprendre au travers du balayage fidèle de l'espace des chemins de propagation. La formulation associée traduit bien le poids relatif de ces chemins, et le propagateur s'explique alors complètement en décrivant la façon de balayer cet espace de chemin. Cette description est souvent associée à la capacité à la reformulation du problème en terme intégral; par exemple, pour certains opérateurs différentiels les reformulations en intégrales de Fredholm autorisent (sous certaines conditions néanmoins) une lecture du problème en espace de chemin. En physique une rupture importante est franchie par la proposition de Mark Kac et Richard Feynman lorsqu'ils étendent à une plus grande classe d'opérateur différentiel l'idée de l'intégrale de chemin qui en l'occurrence définit techniquement une intégrale sur une mesure de Wiener [7, 8], mais surtout permet de projeter une pensée propagative sur un espace de chemin pour des descriptions physiques originellement construites de façon orthogonale.
- La dimension statistique spécifique au modèle de la propagation de la lumière facilite la mise oeuvre de sa résolution par des méthodes de type Monte Carlo. La traduction numérique est analogue à l'image physique et il est confortable d'en assurer une représentation fidèle au travers de l'algorithme. Néanmoins il n'est nul besoin d'avoir un socle descriptif basé sur une proposition de modélisation statistique pour résoudre par les méthodes de Monte Carlo un problème de la physique : en effet ces méthodes peuvent se mettre en oeuvre dès lors que la grandeur à calculer peut s'écrire comme l'espérance d'une variable aléatoire [9, 10]. Toute la finesse de la pratique de la méthode résulte du bon choix de la variable aléatoire, souvent dans un espace de grande dimension (ou même infini), ce qui demande en général une connaissance approfondie de la physique décrite et la construction d'un à priori fidèle sur les mécanismes à l'oeuvre dans le problème. Les formulations en intégrales de chemins sont de bons candidats à la traduction du problème en termes statistiques, ne serait-ce que par la capacité à définir l'observable comme une somme de contributions qu'il est souvent possible, à peu de frais, de lire comme une espérance.

Changer le regard

On perçoit dans la description précédente que le modèle utilisé en synthèse d'image de la propagation et interaction de la lumière avec la matière constitue un guide de pensée idéal pour la transposition à des physiques de natures très différentes. Les éléments clés qui viennent d'être mentionnés font apparaître la nécessité de transformer radicalement les formulations eulériennes usuelles des physiques linéaires de champs (électromagnétisme, mécanique des déformations solides, transferts thermiques, acoustique, etc..) de façon à permettre une lecture propagative sur un espace de chemins adapté qu'il faudra balayer statistiquement.

Il faut commencer par abandonner l'idée du calcul du champs dans son intégralité, et c'est probablement celle qui heurte le plus la pensée eulérienne des numériciens. L'observable, qui est une intégrale sur les variables du champs sera la seule grandeur à évaluer. Les mécanismes d'évolution ou de couplage ne se pensent plus localement puisque seules les sources aux limites spatiales, temporelles ou prescrites dans le champs sont responsables de l'évolution de l'observable.

Il ne suffit pas d'écrire le propagateur formellement, il faut maintenant en avoir une formulation en intégrale de chemin. Selon les champs de la physique adressés, ces formulations existent dans de nombreuses situations. Concernant par exemple la propagation des ondes électromagnétique, les formulations en intégrales de Fredholm sont fréquentes et le passage à une lecture en espace de chemin peut se faire sous certaines conditions de convergence des méthodes de noyaux itérés. Dans les physiques incluant des processus advecto-diffusifs la proposition de Feynman-Kac répond directement à cette question en écrivant la grandeur à estimer comme l'espérance d'un processus aléatoire sur le domaine représentant l'espace des chemins. Dans ce dernier cas

il reste néanmoins un travail important sur cette intégrale fonctionnelle pour définir des stratégies exacte ou approchée de balayage des chemins issus des processus Brownien qui en sont les noyaux.

Illustrer en physique des transferts thermiques.

Notre proposition pourrait s'illustrer sur différents champs de la physique linéaire et aboutir à la même démonstration de principe. Pour sûr, le travail est à faire à chaque question mettant en oeuvre des phénoménologies nouvelles car les écueils et les limites ne se situent pas aux mêmes endroits. Néanmoins la force de la proposition se situe dans son caractère méthodologique; chaque spécialiste disciplinaire ouvrira les questions pertinentes et en tant que tel définira les axes de recherches à privilégier au regard de la perception qu'il aura des nouvelles potentialités d'exploration.

Le choix d'illustrer la démarche dans le champs des transferts thermiques permet :

- De traiter la question des couplages phénoménologiques : différents modes de transferts thermiques interagissent dans les situations d'études.
- De questionner la nature des observables (point sonde, valeur intégrée, etc..).
- De produire des calculs infaisables par les méthodes traditionnelles sans dégrader les modèles, du fait de la multiplicité des rapports d'échelles ou de la complexité de la scène géométrique.

Des modèles de transferts simplifiés comme support à la démonstration.

Les modèles de transfert que nous choisissons ici se résument assez simplement de la façon suivante :

- Dans les solides constituant la scène le seul mode de transfert à l'oeuvre est la conduction thermique isotrope en présence potentiellement de sources volumiques :

$$\rho C \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (-\lambda \vec{\nabla} \theta) + p \quad (1)$$

$\theta \equiv \theta(\vec{x}, t)$ représente le champs de température. ρ , C et λ représentent respectivement la masse volumique, la capacité calorifique et la conductivité thermique. $p \equiv p(\vec{x}, t)$ représente le terme de puissance volumique.

- Les cavités fermées fluide sont représentées par une température unique $\theta_F \equiv \theta_F(t)$. Les échanges entre le fluide et les parois englobantes sont donnés par des modèles de flux linéaires avec des coefficients d'échange dépendant du point sur la paroi $h \equiv h(\vec{x})$:

$$m_F C_F \frac{\partial \theta_F}{\partial t} = \int_{\partial \mathcal{D}_S} h(\theta_{\partial \Omega} - \theta_F) d\vec{y} \quad (2)$$

Le domaine \mathcal{D}_S représente la paroi englobant la cellule fluide et $\theta_S \equiv \theta_S(\vec{x}, t)$ est la température en tout point de cette paroi. Le fluide est transparent au rayonnement thermique.

- Le transfert d'énergie radiative dans ce modèle n'existe qu'entre zones surfaciques, et toute les surfaces sont assimilées à des corps noirs. Pour les raisons énoncées plus haut ce transfert radiatif a été linéarisé; l'objectif n'est en aucun cas ici de discuter les domaines de validité de cette hypothèse bien connue par les thermiciens. Les couplages entre zones fluides ou zones solides se font donc au travers des flux de surface, par l'écriture des continuités locales. Ainsi en tout point de l'ensemble des interfaces solides-fluides ou n'est prescrit ni la température ni le flux on a :

$$-\lambda \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{n} = h_F(\theta_F - \theta) + h_R(\theta_R - \theta) \quad (3)$$

avec $\theta_R = \int_{D_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) \theta_{\partial \Omega}(\vec{x}_\gamma, t) d\gamma$

h_R représente le coefficient d'échange radiatif issu de la linéarisation. $\theta_R \equiv \theta_R(\vec{x}, t)$ est la température radiative en chaque point, elle se calcule comme une moyenne sur l'ensemble des chemins optiques des températures de surface au bout de chaque chemin.

- Le problème se ferme en imposant aux bornes du système complet un ensemble de conditions aux limites (Dirichlet, Newman, Mixte) et des conditions initiales.

Reformulation du problème

Formellement l'expression de la température en un point du milieu solide (eq. 1) à un instant donné se réécrit directement comme une espérance à partir de la formulation de Feynman-Kac [11] pour laquelle l'espace des chemins est défini à partir d'un processus Brownien standard. De nombreux travaux ont permis de proposer des schémas pour estimer numériquement le processus Brownien de façon exacte ou approché selon les configurations d'études. Nous pouvons citer par exemple tous les travaux en filiation avec la proposition "Walk on Spheres" qui consiste à échantillonner de façon exacte la fonction de Green de premier passage sur une succession de sphères [12, 13, 14]. Dans cette représentation du propagateur, en milieu homogène, l'approximation est ramenée au bord du domaine pour permettre au processus de trouver une issue. Concernant les phénomènes de conduction de la chaleur à proprement parlé, on considère que c'est le travail de Hji-Sheikh et Sparrow qui fait office de précurseur dans ce champ applicatif disciplinaire [15]. Ils introduisent notamment le vocabulaire de floating random walk [16] qui signifie que l'on peut s'affranchir de grilles spatiales introduites préalablement au calcul. Ce travail a donné lieu à diverses études dans le champ du calcul numérique (voir par exemple [17, 18]) ainsi que nombreuses variantes avec entre autre la possibilité d'inclure des milieux anisotropes [19], de tenir compte de tous types de conditions aux limites (températures variables, convectives, etc..) [20] ou bien d'inclure des dépendances spatiales sur le tenseur de conductivité et le champs de sources [21]. La dernière édition de l'ouvrage d'Ozizik donne un aperçu de l'état de l'art des méthodes de Monte Carlo pour la conduction [22]. Dans la proposition que nous retenons ici pour la partie conduction, la marche aléatoire pour une conductivité uniforme est spatialement à pas constant avec un schéma affiné près des frontières, et la durée du saut est distribuée exponentiellement (eq. 4). Quelque soit la proposition retenue pour cette estimation numérique on est souvent ramené à balayer un espace de chemins de marches aléatoires dans la partie solide.

$$\theta(\vec{x}, t) = \int_0^\infty d\tau \exp(-a\tau) \left[H(\tau - t_0)\theta(\vec{x}, t_0) + H(t_0 - \tau) \left\{ \frac{p(\vec{x}, t - \tau)}{\rho C} + \int_{4\pi} d\omega(\vec{u}) \frac{1}{4\pi} \theta(\vec{x} + \delta(\vec{x}, \vec{u})\vec{u}, t - \tau) \right\} \right] \quad (4)$$

avec $a = \frac{\lambda}{\rho C}$. $H(x)$ est la fonction de Heaviside. $\delta(\vec{x}, \vec{u})$ est le pas de la marche, potentiellement variable en espace et en direction selon les schémas choisis. Si dans cette équation la position est un point d'une interface alors $\theta(\vec{x}, t) = \theta_{\partial\Omega}(\vec{x}_{\partial\Omega}, t)$.

Dans la partie fluide la formulation en propagation est plus triviale : la température du fluide s'écrit simplement à partir du propagateur fluide comme la somme d'une contribution de la condition initiale et d'une contribution des températures de parois pondérée par les coefficients d'échanges locaux. La traduction de cette formulation en une espérance n'est qu'un jeu d'écriture qui ne présente aucune difficulté. Le résultat de cette écriture conduit à une mise en oeuvre en terme statistique qui consiste à échantillonner le temps selon l'exponentielle du processus capacitif puis, si la condition initiale n'est pas trouvée, à échantillonner un point sur la surface selon la distributions des coefficients d'échanges.

$$\theta_F(t) = \int_0^\infty d\tau b \exp(-b\tau) \left[H(\tau - t_0)\theta(\vec{x}, t_0) + H(t_0 - \tau) \int_{\partial\Omega} d\vec{x}_{\partial\Omega} \frac{1}{S_{\partial\Omega}} \theta_{\partial\Omega}(\vec{x}_{\partial\Omega}, t - \tau) \right] \quad (5)$$

avec $b = \frac{\int_{\partial\mathcal{D}_S} h(\vec{y}) d\vec{y}}{m_F C_F}$.

Dans le choix descriptif que nous avons proposé ici, reste la question du couplage par les interfaces. La discrétisation de la continuité du flux (eq 3) permet sans difficultés d'écrire un choix probabiliste sur la nature du chemin à poursuivre (radiatif, conductif ou convectif).

$$\theta_{\partial\Omega}(\vec{x}_{\partial\Omega}, t) = \frac{\frac{\lambda}{\delta}}{\frac{\lambda}{\delta} + h_F + h_R} \theta(\vec{x}_{\partial\Omega} + \delta\vec{n}, t) + \frac{h_F}{\frac{\lambda}{\delta} + h_F + h_R} \theta_F(t) + \frac{h_R}{\frac{\lambda}{\delta} + h_F + h_R} \int_{D_\Gamma} p_\Gamma(\gamma) \theta_{\partial\Omega}(\vec{x}_\gamma, t) d\gamma \quad (6)$$

Ainsi la marche aléatoire qui arrive sur une frontière (qui n'est pas une condition aux limites) peut se poursuivre par :

- un chemin radiatif qui impactera nécessairement un nouveau point de surface au même instant (stationnarité du transfert radiatif)
- un chemin convectif qui impactera un nouveau point de surface à un instant antérieur ou se terminera à la condition initiale en temps.
- un chemin conductif (marche aléatoire) qui impactera un nouveau point de surface à un instant antérieur ou se terminera à la condition initiale en temps.

Mise en oeuvre

La reformulation du problème a permis d'extraire l'idée des chemins thermiques. Partant d'un point à un instant donné, le chemin parcourt la scène géométrique en remontant le temps et se termine lorsqu'il rencontre une condition aux limites ou initiale. Les questions informatiques sont multiples mais la plus fondamentale concerne la gestion des intersections entre le chemin et l'ensemble des surfaces qui constituent la scène. Depuis de nombreuses années en synthèse d'image, cette question est au coeur des préoccupations et les stratégies algorithmes et informatiques qui ont été proposées ont permis d'atteindre un très haut niveau de performance. L'idée repose sur la capacité à pouvoir gérer les intersections des chemins avec les primitives de la scène par une focalisation de l'information autour du point courant qui ne nécessite pas de parcourir pour chaque événement d'interaction la totalité de la scène; le nombre de primitive pour une scène complexe peut aller jusqu'à plusieurs centaines de millions d'éléments, ce qui disqualifie automatiquement toute stratégie globale.

La mise en oeuvre que nous proposons s'appuie sur les bibliothèques les plus récentes d'accélération de suivi de rayons dans les géométries complexes. Le balayage de l'espace des chemins se fait statistiquement au travers de la méthode de Monte Carlo et peut être parallélisé massivement puisque tous les chemins sont complètement indépendants.

L'illustration de l'ensemble des éléments qui ont été décrit dans la partie méthodologique est accessible dans une version simplifiée bidimensionnelle sur une application en ligne de démonstration que nous avons développé (http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/test/fr/training/tool/therm/). Son utilisation est décrite dans un scénario d'apprentissage de niveau Licence (http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/test/fr/training/scenario/tool/therm/). La figure 2 issue de cette application est un exemple qui permet d'illustrer la nature des chemins thermiques. On peut appréhender sur cette illustration une partie de l'intérêt de la proposition : on constate que quelque soit la scène, les chemins ont un niveau de complexité comparable en terme de visite de la scène. Ainsi avec une gestion efficace de l'intersection des chemins par les primitives de la scène, le temps de calcul est similaire pour les deux scènes. La méthode de résolution ne nécessite aucun maillage de la scène, ce qui eu égard aux méthodes usuelles de résolutions de modèles en champs produit une rupture assez radicale dans le rapport à l'objet d'étude; la contrepartie, comme nous l'avons déjà mentionné, est que le calcul s'effectue sur une unique observable qui peut néanmoins être une intégrale spatiale et temporelle d'une fonction (ou opérateur) linéaire des variables d'états du champs.

Illustrations sur des scènes complexes

Les figures 3, 4 et 5 sont trois illustrations de calculs de thermique dans des géométries complexes. Les descriptions des scènes et les calculs effectués sont détaillés dans les légendes. Nous avons volontairement choisi de ne présenter que des situations modélisées par les équations de la thermique 1, 2 et 3. Il faut mentionner qu'il n'y a aucune difficulté conceptuelle supplémentaire à considérer des modèles différents (parois non noires radiativement, processus avecto-diffusif pour le transport de l'énergie dans le fluide, propriétés thermo-physique anisotrope et hétérogène, échanges radiatif dans des milieux fluides participants, etc..).

Les codes de calcul s'appuient sur la librairie Star-Engine(<https://www.meso-star.com/projects/star-engine.html>) qui s'appuie elle même sur la librairie Intel® Embree (<https://software.intel.com/en-us/rendering-framework>) pour la partie suivi de rayons. Ces librairies sont toutes sous licences libres.

Le propagateur : performance et didactique

Les méthodes de Monte Carlo, au delà des performances purement calculatoires, permettent bien souvent de construire un intuitif qui éclaire la façon d'appréhender les problèmes en proposant des images mentales nou-

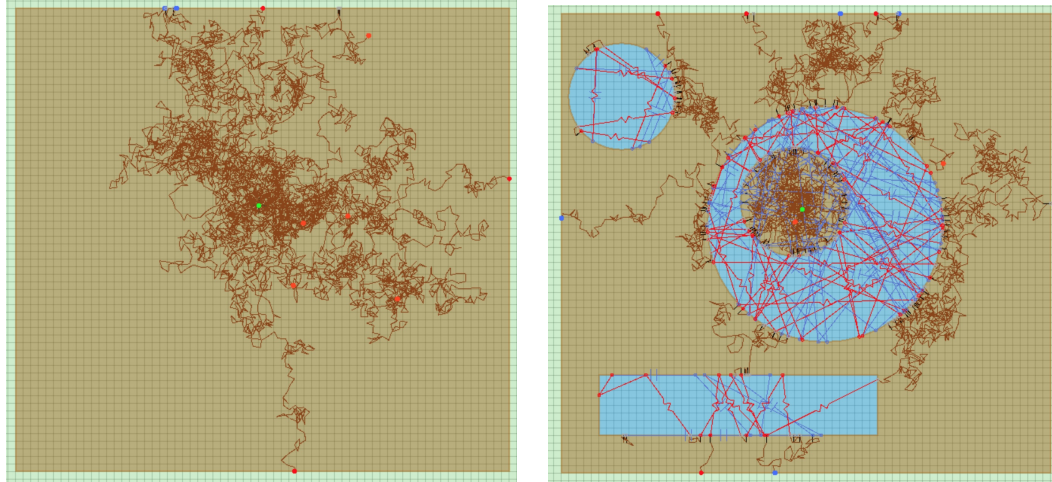


Figure 2: **Démonstrateur**. Les zones bleues représentent les cellules fluides et les zones marrons représentent les solides. Le point vert dans la zone solide centrale est la position de la sonde d’où démarrent les chemins. Les parties conductives des chemins sont représentées en marron, les parties radiatives des chemins sont représentées en rouge avec une symbolique en ligne brisée et les parties convectives des chemins sont représentées en bleu avec une symbolique indiquant une capacité. Les chemins dans cet exemple peuvent se terminer soit dans le milieu si le temps est remonté jusqu’à la condition initiale, soit sur la frontière du rectangle extérieur faisant office de conditions aux limites. Une dizaine de chemins sont tracés dans chaque figure. La figure de gauche illustre une situation purement conductive alors que la figure de droite illustre une situation couplée avec des zones fluides et des zones solides impliquant des transferts par conduction, convection et rayonnement.

velles (construction des algorithmes à variance nulle, échantillonnage par importance, reformulation intégrale, etc..)[23]. Une force supplémentaire de la méthode réside dans sa capacité à permettre des calculs des sensibilités paramétriques ou géométriques à cout de calcul supplémentaire quasi-nul [24, 25]. Dans le même esprit des développements récents ont permis de montrer que dans certaines situations, en stockant différemment l’information lors du balayage statistique, on peut reconstruire une fonctionnelle des paramètres du problèmes pour le cout d’un seul calcul Monte Carlo ([26, 27]).

Dans la proposition que nous faisons ici tous ces avantages sont conservés et l’articulation méthodologique qui se construit autour du propagateur apporte plusieurs éclairages nouveaux :

- Du point de vue didactique la compréhension détaillée des mécanismes qui conduisent, lors du balayage de l’espace intégral, à favoriser ou au contraire interdire certains chemins ouvre de nouvelles perspectives cognitives qui semble intéressantes à tester pour des situations d’apprentissage. Il est effectivement aisé de deviner globalement comment les chemins se sélectionnent au travers des jeux de probabilités (notamment aux interfaces) et par la même de donner une intelligibilité nouvelle au système étudié. Illustrons par l’exemple simple d’une zone fortement conductrice (λ élevé) entourée d’une zone isolante (λ faible) : il est facile de voir qu’aux interfaces entre les deux zones la probabilité est grande pour que le chemin bascule dans la zone conductrice. De fait on comprend alors aisément qu’un chemin qui démarre à l’intérieur de la zone conductrice rebondira de nombreuses fois avant de pouvoir basculer dans la zone isolante. Le point de départ dans la zone conductrice est en quelque sorte ”oublié” du fait de la longueur du chemin et le point de sortie de la zone est quasi uniforme sur la frontière de cette zone. Ainsi nul besoin de connaître l’histoire à venir du chemin pour savoir que tous les chemins qui démarrent dans la zone conductrices ont quasiment la même histoire statistique et donc que cette zone est quasi-isotherme. Cette piste de réflexion est à l’origine d’un projet de recherche didactique énoncé à l’adresse suivante : http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/test/fr/platform/usecase/didactic_energy/.
- Ce que fait le calcul lors du balayage des chemins n’est finalement rien d’autre qu’échantillonner statistiquement le propagateur. Cet échantillonnage ne dépend que de l’ensemble des paramètres et de la géométrie qui définit le problème étudié. Ce balayage est par construction totalement indépendant de la

connaissance du champs de sources, des conditions aux limites et initiales. Si l'on stocke les résultats de cet échantillonnage, on obtient un estimateur du propagateur qui pourra par des post-traitements très peu coûteux renseigner sur le résultat pour un jeu quelconque de configurations thermiques prescrites par l'utilisateur.

La limite du Non Linéaire.

Dans les physique linéaires, de nombreuses questions subsistent notamment sur les capacités à trouver des représentations manipulables tant du point de vue formel que statistiquement au moment de la résolution. Cependant, on trouve dans la littérature abondante de chaque champs disciplinaire des travaux de fond sur la méthode de Monte Carlo qui apportent graduellement des réponses en terme d'efficacité aux questions les plus difficiles.

La question qui crée une rupture dans cette pensée est profondément associée au passage à des questions pour lesquelles les modèles physiques sont non linéaires. Dans ces représentations, par définition, il n'est plus possible de construire une description propagative, ce qui est équivalent à dire qu'il est impossible de penser le problème en terme de superposition. Du point de vue des méthodes statistiques la situation a longtemps été considérée comme n'ayant pas d'autres issues que de proposer des alternatives pour lesquelles les propriétés fondamentales nécessaires à la méthodologie présentée ici ne sont plus assurées (par exemple les méthodes DSMC en fluide). Depuis peu différents travaux ont permis de montrer qu'il y avait des alternatives descriptives qui permettent à nouveau de retrouver les éléments essentiels du cadre linéaire [28, 29, 30]. Pour le moment le niveau de généralité et de praticabilité est très partiel mais les portes sont ouvertes et les premières démonstrations dans différents domaines applicatifs constituent déjà un support de travail non négligeable [31], notamment en ce qui concerne les applications au domaine de la conversion énergétique. L'approche statistique étendue au non linéaire a déjà produit en effet des outils de conception aboutis pour des centrales à énergie solaire concentrée (http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/test/fr/platform/usecase/solar_power_plants/) et des procédés photobioréactifs (http://www.laplace.univ-tlse.fr/edstar_demo/test/fr/platform/usecase/photobioreactors/), où l'on retrouve tous les bénéfices de l'approche en terme de complexité géométrique et de quasi-infinité des rapports d'échelle.

Parmi les idées avancées dans cette extension au non linéaire, la technique des *collisions nulles* [32, 33, 34] prend une place toute particulière. Il s'agit ici de la revisite d'une idée très ancienne, mais qui jusqu'à peu n'avait été perçue que comme une "astuce" employée communément par les physiciens du transport linéaire lorsqu'ils étaient confrontés à la gestion des hétérogénéités volumiques ou des fluctuations temporelles fortes. Comment la question d'étendre Monte Carlo au traitement des *non linéarités* a-t-elle pu émerger de la physique du transport *linéaire* ? A travers l'expression formelle du propagateur. Dans cette expression la fonction exponentielle est appliquée à des intégrales des propriétés du milieu : typiquement la loi d'extinction exponentielle de Beer qui porte sur l'intégrale de la section efficace le long du chemin emprunté par la particule. Si les propriétés du milieu sont hétérogènes (e.g. un champ de température et de concentration induisant un champ de section efficace), la question d'évaluer les intégrales correspondantes est centrale lors de l'évaluation de la solution du problème de transport linéaire lui-même. L'équation de transport est linéaire, sa solution formelle en termes d'intégrales de chemin ne l'est pas : on intègre sur l'espace des chemins une exponentielle d'une nouvelle intégrale, le long du chemin. C'est là typiquement l'objet de l'extension de Monte Carlo au non linéaire : une intégrale d'une fonction non linéaire d'une intégrale n'est pas a priori une intégrale unique et son traitement statistique n'est pas immédiat.

Observant que dans la pratique la technique des *collisions nulles* répond à cette question de façon opérationnelle, de nombreux travaux récents ont exploré le coeur théorique de cette proposition afin d'en assoir la rigueur et d'en étendre la portée. Ces travaux ont été menés au sein des communautés physicienne et de synthèse d'image avec un affichage fort de tous les bénéfices réciproques résultant de cet effort commun. Les répercussions applicatives sont effectivement importantes pour les deux communautés qui perçoivent la structuration d'un édifice théorique dans une perspective de longue haleine [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49]

References

- [1] Matt Pharr, Wenzel Jakob, and Greg Humphreys. *Physically based rendering: From theory to implementation*. Morgan Kaufmann, 2016.
- [2] Yonghao Yue. Bringing computer and physics closer. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 1036, page 012013. IOP Publishing, 2018.
- [3] James T. Kajiya. The rendering equation. *SIGGRAPH Comput. Graph.*, 20(4):143–150, August 1986.
- [4] Brent Burley, David Adler, Matt Jen-Yuan Chiang, Hank Driskill, Ralf Habel, Patrick Kelly, Peter Kutz, Yining Karl Li, and Daniel Teece. The design and evolution of disney’s hyperion renderer. *ACM Transactions on Graphics*, 37(3), August 2018.
- [5] Jonas Lext, Ulf Assarsson, and Tomas Moller. A benchmark for animated ray tracing. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 21(2):22–31, 2001.
- [6] Richard P Feynman. The theory of positrons. *Physical Review*, 76(6):749, 1949.
- [7] Mark Kac. On distributions of certain wiener functionals. *Transactions of the American Mathematical Society*, 65(1):1–13, 1949.
- [8] R. P. Feynman and Hibbs A. R. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [9] John Hammersley. *Monte carlo methods*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] Emmanuel Gobet. *Monte-Carlo methods and stochastic processes: from linear to non-linear*. Chapman and Hall/CRC, 2016.
- [11] Bernard Lapeyre, Etienne Pardoux, and Remi Sentis. *Introduction to Monte-Carlo methods for transport and diffusion equations*, volume 6. Oxford University Press on Demand, 2003.
- [12] Mervin E. Muller. Some Continuous Monte Carlo Methods for the Dirichlet Problem, 1956.
- [13] Michael Mascagni and Chi-Ok Hwang. epsilon-Shell error analysis for Walk on Spheres algorithms. *Mathematics and Computers in Simulation*, 63(2):93–104, 2003.
- [14] Chi-Ok Hwang, Sungpyo Hong, and Jinwoo Kim. Off-centered walk-on-spheres (wos) algorithm. *Journal of Computational Physics*, (October), 2015.
- [15] A Haji-Sheikh and Ephraim M Sparrow. The solution of heat conduction problems by probability methods. *Journal of Heat Transfer*, 89(2):121–130, 1967.
- [16] A Haji-Sheikh and E M Sparrow. The floating random walk and its application to Monte Carlo solution of heat equation. *Journal SIAM on Applied Mathematics*, 14(2):370–389, 1966.
- [17] R.E. Morokoff, W.J. and Cflisch. A quasi-monte Carlo approach to particle simulation of the heat equation. *Siam J. Numer. Anal.*, 30(6):1558–1573, 1993.
- [18] Anders Eskil Österling. Diffusion equation and monte carlo. *Available at SSRN 1824462*, 2007.
- [19] Farshad Kowsary and Saeed Irano. Monte Carlo Solution of Transient Heat Conduction in Anisotropic Media. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 20(2):342–346, apr 2006.
- [20] B. Cho and N. Cho. Monte Carlo Method Extended To Heat Transfer Problems With Non-Constant Temperature and Convection Boundary Conditions. *Nuclear Engineering and Technology*, 42(1):65–72, 2010.
- [21] P. Chiovaro and P.a. Di Maio. On the adoption of the Monte Carlo method to solve one-dimensional steady state thermal diffusion problems for non-uniform solids. *Applied Mathematical Modelling*, 37(23):9707–9721, 2013.

- [22] M Necati Ozisik. *Boundary Value Problems of Heat Conduction*. Courier Corporation, 2013.
- [23] Jérémie Delatorre, Germain Baud, Jean-Jacques Bézian, Stéphane Blanco, Cyril Caliot, Jean-François Cornet, Christophe Coustet, Jérémie Dauchet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, et al. Monte carlo advances and concentrated solar applications. *Solar Energy*, 103:653–681, 2014.
- [24] Maxime Roger, Stéphane Blanco, Mouna El Hafi, and Richard Fournier. Monte carlo estimates of domain-deformation sensitivities. *Physical review letters*, 95(18):180601, 2005.
- [25] A De Lataillade, Stéphane Blanco, Y Clergent, Jean-Louis Dufresne, Mouna El Hafi, and Richard Fournier. Monte carlo method and sensitivity estimations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75(5):529–538, 2002.
- [26] William L Dunn. Inverse monte carlo analysis. *Journal of Computational Physics*, 41(1):154–166, 1981.
- [27] 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, 2017.
- [28] Guillaume Terrée, Mouna El Hafi, Stéphane Blanco, Richard Fournier, Jérémie Dauchet, and Jacques Gautrais. Addressing the gas kinetics boltzmann equation with branching paths statistics. *arXiv preprint arXiv:1712.02900*, 2017.
- [29] Abdujabor Rasulov, Aneta Karaivanova, and Michael Mascagni. Quasirandom sequences in branching random walks. *Monte Carlo Methods and Applications mcma*, 10(3-4):551–558, 2004.
- [30] Ivan T Dimov. *Monte Carlo methods for applied scientists*. World Scientific, 2008.
- [31] Jeremi Dauchet, Jean-Jacques Bézian, Stephane Blanco, Cyril Caliot, Julien Charon, Christophe Coustet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, Olivier Farges, Vincent Forest, et al. Addressing nonlinearities in monte carlo. *Scientific reports*, 8(1):13302, 2018.
- [32] J P Boeuf and E Marode. A monte carlo analysis of an electron swarm in a nonuniform field: the cathode region of a glow discharge in helium. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 15(11):2169, 1982.
- [33] E Woodcock, T Murphy, P Hemmings, and S Longworth. Techniques used in the gem code for monte carlo neutronics calculations in reactors and other systems of complex geometry. In *Proc. Conf. Applications of Computing Methods to Reactor Problems*, volume 557, 1965.
- [34] Katsuhisa Koura. Null-collision technique in the direct-simulation monte carlo method. *The Physics of fluids*, 29(11):3509–3511, 1986.
- [35] V. Eymet, D. Poitou, M. Galtier, M. El Hafi, G. Terrée, and R. Fournier. Null-collision meshless Monte-Carlo. Application to the validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, pages 1–13, June 2013.
- [36] M. Galtier, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, A. Khuong, B. Piaud, and G. Terrée. Integral formulation of null-collision Monte Carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 125:57–68, April 2013.
- [37] Balazs Molnar, Gabor Tolnai, and David Legrady. Variance reduction and optimization strategies in a biased woodcock particle tracking framework. *Nuclear Science and Engineering*, 190(1):56–72, 2018.
- [38] Hironobu Iwabuchi and Rintaro Okamura. Multispectral monte carlo radiative transfer simulation by the maximum cross-section method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 193:40–46, 2017.
- [39] László Szirmay-Kalos, Milán Magdics, and Mateu Sbert. Multiple scattering in inhomogeneous participating media using rao-blackwellization and control variates. In *Computer Graphics Forum*, volume 37, pages 63–74. Wiley Online Library, 2018.

- [40] Brent Burley, David Adler, Matt Jen-Yuan Chiang, Hank Driskill, Ralf Habel, Patrick Kelly, Peter Kutz, Yining Karl Li, and Daniel Teece. The design and evolution of disney’s hyperion renderer. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 37(3):33, 2018.
- [41] Jan Novák, Andrew Selle, and Wojciech Jarosz. Residual ratio tracking for estimating attenuation in participating media. *ACM Trans. Graph.*, 33(6):179–1, 2014.
- [42] Per H Christensen, Wojciech Jarosz, et al. The path to path-traced movies. *Foundations and Trends® in Computer Graphics and Vision*, 10(2):103–175, 2016.
- [43] László Szirmay-Kalos, Iliyan Georgiev, Milán Magdics, Balázs Molnár, and Dávid Légrády. Unbiased light transport estimators for inhomogeneous participating media. In *Computer Graphics Forum*, volume 36, pages 9–19. Wiley Online Library, 2017.
- [44] Jan Novák, Iliyan Georgiev, Johannes Hanika, and Wojciech Jarosz. Monte carlo methods for volumetric light transport simulation. In *Computer Graphics Forum*, volume 37, pages 551–576. Wiley Online Library, 2018.
- [45] Peter Kutz, Ralf Habel, Yining Karl Li, and Jan Novák. Spectral and decomposition tracking for rendering heterogeneous volumes. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 36(4):111, 2017.
- [46] Benedikt Bitterli, Srinath Ravichandran, Thomas Müller, Magnus Wrenninge, Jan Novák, Steve Marschner, and Wojciech Jarosz. A radiative transfer framework for non-exponential media. *ACM TRANSACTIONS ON GRAPHICS*, 37(6), 2018.
- [47] Hironobu Iwabuchi. Efficient monte carlo methods for radiative transfer modeling. *Journal of the atmospheric sciences*, 63(9):2324–2339, 2006.
- [48] J-M Tregan, S. Blanco, J. Dauchet, M El Hafi, R. Fournier, L Ibarrrart, P Lapeyre, and N Villefranche. Convergence issues in derivatives of Monte Carlo null-collision integral formulations: a solution. Submitted to *Journal of Computational Physics*, March 2019.
- [49] Najda Villefranche, Fleur Couvreur, Richard Fournier, Stéphane Blanco, Céline Cornet, Vincent Eymet, Vincent Forest, and Jean-Marc Tregan. Path-tracing monte carlo libraries for 3d radiative transfer in cloudy atmospheres. *arXiv preprint arXiv:1902.01137*, 2019.

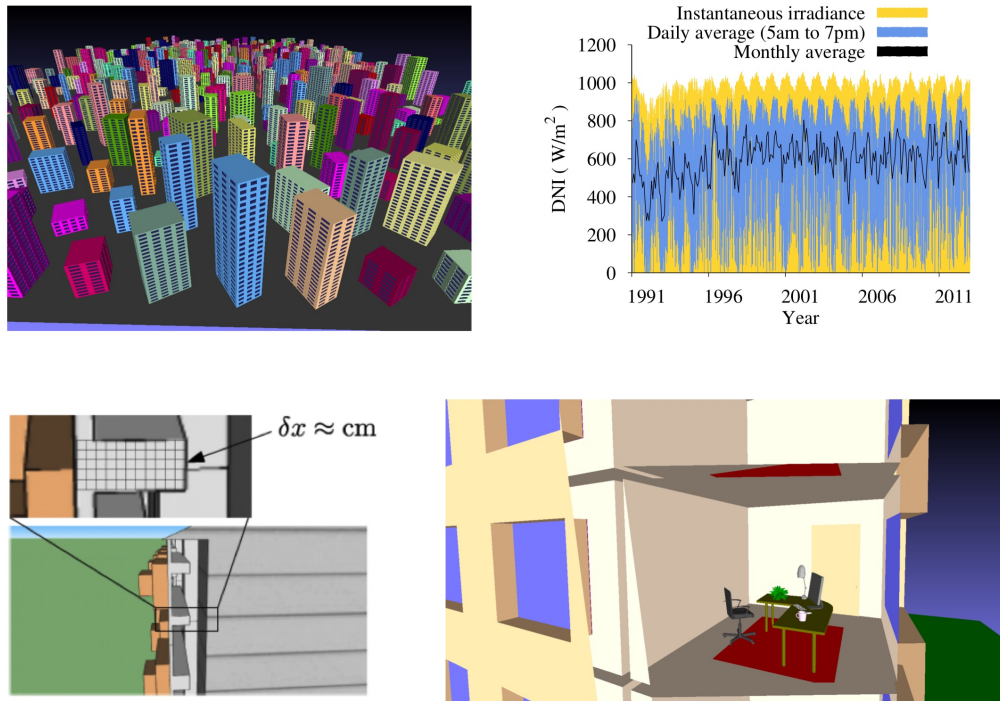


Figure 3: **Déperditions thermiques d'une ville.** La scène considérée est une ville constituée de centaines de bâtiments (fig haut gauche). Chaque bâtiment est décrit avec un niveau de détail pouvant descendre à l'échelle centimétrique (cf bardage fig bas gauche). Les pièces à l'intérieur des bâtiments (cf bardage fig bas droite) constituent des cavités fluides, pour lesquelles une ou plusieurs des parois à température imposées font office de source. A l'extérieur des bâtiments on impose des conditions météorologiques décrites temporellement à l'échelle de la minute. Les équations de la thermique données dans la partie modèle sont résolues par la méthode de Monte Carlo après réécriture en intégrale de chemins. Les chemins thermiques peuvent passer d'une pièce à l'autre ou d'un bâtiment à l'autre et alternant entre les différents modes de transferts; il n'y a pas de conditions initiales dans cette configurations ce qui implique que chaque chemin se termine sur une paroi à température imposée ou sur les conditions aux limites données par les conditions météorologiques. Plusieurs types de calcul ont été fait sur cette configuration: 1) La température du fluide d'une pièce quelconque d'un bâtiment à un instant donné. 2) La température moyenne d'un bâtiment sur une période hivernale. 3) La déperdition thermique de l'ensemble de la ville sur une période de 50 ans. Chacun des calculs est effectué avec 10^5 réalisations ce qui assure dans ce cas une erreur statistique de l'ordre du pour cent. On constate dans cette situation que les chemins trouvent assez facilement une issue et que peu de temps est nécessaire pour réaliser les calculs (de l'ordre de la minute de temps de calcul sur un ordinateur de bureau dans chacun des cas). La performance est dans ce cas très associée à la gestion efficace de la donnée au cours des intersections des chemins avec les primitives géométriques (ici de l'ordre de plusieurs millions). Ces calculs totalement inaccessibles aux méthodes usuelles de résolution numérique des champs sont donnés à titre d'illustration dans une configuration que ne pose pas de problème particulier. Nous pourrions décrire des situations plus délicates pour lesquelles les chemins pourrait être "piégés" plus longtemps avant de trouver une issue, ce qui pourrait augmenter considérablement les temps de calcul (nous reportons ces discussions sur des articles à venir).

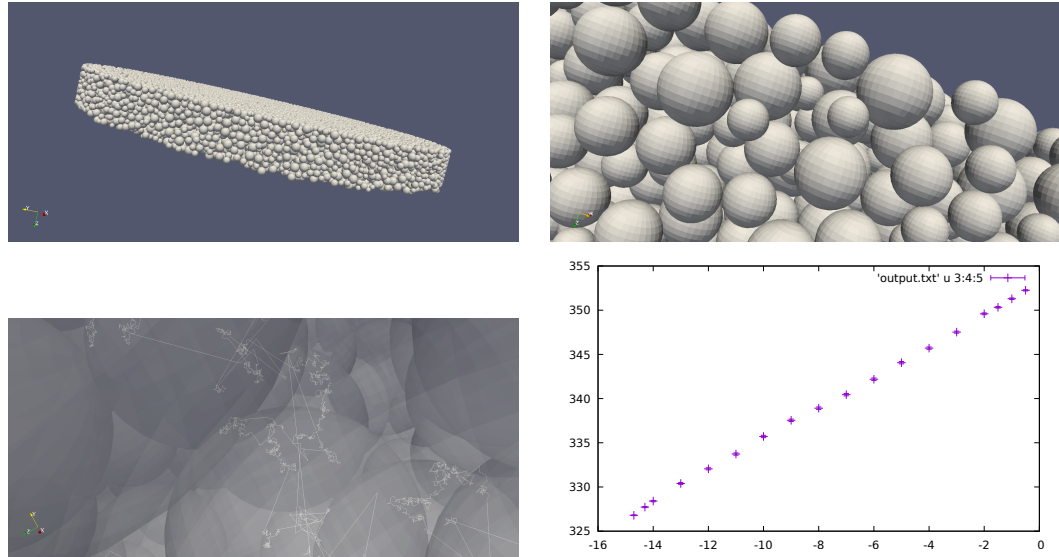


Figure 4: **Calcul d'une conductivité thermique effective d'un sol de comète.** La scène considérée est un assemblage de 210000 sphères (cf fig a et b) qui peuvent s'interpénétrer localement sur la zone de contact. Cette galette de sphères est représentative de la constitution d'un sol de comète pour lesquels les astrophysiciens ont le besoin de calculer finement la thermique en vue d'extraire des grandeurs homogènes équivalentes telle qu'une conductivité apparente. La galette de sphères est dans le vide ce qui conduit à une absence de transferts thermiques convectifs à l'intérieur de la structure. Les équations résolues sont celles données dans la partie méthodologique sans équations fluides et échanges convectifs. Les chemins thermiques alternent donc entre des chemins conductifs à l'intérieur des sphères et des chemins radiatifs entre les sphères (fig c). La situation étudiée est stationnaire sans source volumique, ce qui a pour conséquence que les chemins trouvent une issue uniquement aux conditions aux limites. Dans la situation étudiée, un flux thermique est imposé sur une des base de la galette, l'autre base est à température imposée, et le tout est plongé dans une boîte isolée thermiquement. Les calculs consistent ici à évaluer la température sur des plans de coupe parallèle aux bases. La figure (d) est un exemple de résultats obtenus par une vingtaine de calcul Monte Carlo à différentes cotes du plan de coupe. Le nombre de réalisations est de l'ordre de 10^5 et conduit à des incertitudes statistiques (représentées sur les points) suffisamment faibles pour les besoins spécifiques à la question. Le profil est quasi linéaire dans la zone centrale ce qui permet de justifier par le calcul exact la proposition d'un raisonnement en milieu homogène équivalent et de quantifier précisément les conductivités apparentes. Les temps de calcul sont variables et dépendent fortement du rapport des probabilités aux interfaces de basculer d'un mode conductif à radiatif. Dans les situations où les chemins basculent facilement en mode radiatif les temps de calcul sont faibles (quelques minutes sur un ordinateur de bureau) car les chemins trouvent assez facilement une issue. Dans les situations inverses, les chemins peuvent rester piégés plus longtemps dans les sphères et conduire à des temps de temps de calcul beaucoup plus long. Il existe bien sûr dans ce dernier cas des façons de réécrire le problème qui font disparaître cette difficulté calculatoire (nous reportons ces discussions sur des articles à venir).

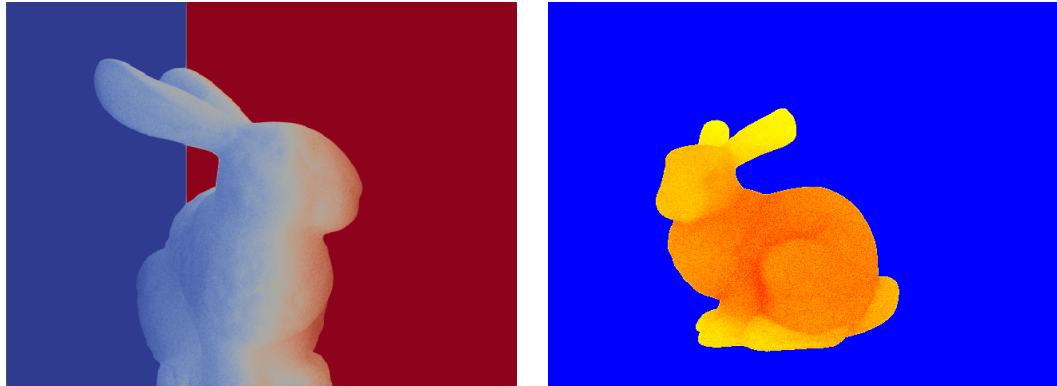


Figure 5: **Résolution thermique d'une scène avec restitution de son image infra-rouge** Dans les deux scènes de cette illustration, un lapin décrit par une surface triangularisée (environ un million de triangles) est positionné dans deux ambiances thermiques distinctes : 1) Le lapin est dans un environnement fluide, une plaque infinie avec deux températures imposées est positionnée derrière lui, aucune source de chaleur volumique à l'intérieur du lapin. 2) Le lapin est dans une cavité fluide isotherme, la source de chaleur interne est une densité de puissance volumique uniforme spatialement. La situation étudiée est stationnaire et le calcul consiste à simuler le rendu d'une caméra thermique infra-rouge positionnée devant la scène. Autrement dit, de calculer pour chaque pixel de l'objectif caméra la température radiative. Dans ce travail, il faut bien relever qu'en dehors des conditions aux limites imposées (plaques ou environnement fluide) aucune température n'est prescrite, cela signifie que chaque chemin radiatif partant de la caméra qui impacte le lapin se transforme en chemin thermique selon la procédure décrite dans le texte de façon à résoudre strictement les équations de la thermique donnée dans la partie méthodologique. Un code de couleur arbitraire (du bleu vers le rouge pour aller du froid vers le chaud) permet de représenter les résultats du calcul dans chaque situation. Chaque image est calculée ici en quelques dizaine de minutes de temps cpu sur un ordinateur de bureau. Dans la première image le lapin est chauffé uniformément par le fluide et différencielement chauffée par échange radiatif avec la plaque, le tout couplé à la conduction interne pour produire le profil observé. Dans la seconde image le lapin est refroidi par l'ambiance fluide et radiative mais la puissance interne uniforme conduit du fait de la géométrie à un profil hétérogène en température, avec par exemple les oreilles plus froides en surface par effet d'ailettes.