

Approche statistique du transfert radiatif et résolution par méthodes de Monte-Carlo

Introduction	48
3.1 Rappels statistiques	50
3.1.1 Variables aléatoires et probabilités	50
3.1.2 Espérance, variance, écart-type et moments d'ordre supérieur à deux	52
3.2 Introduction aux méthodes de Monte-Carlo	54
3.2.1 Les méthodes de Monte-Carlo : un outil stochastique de calcul intégral	55
3.2.2 Estimation de l'erreur statistique	59
3.2.3 Les méthodes de Monte-Carlo en pratique	60
3.3 Étude de la luminance dans un milieu purement absorbant 67	67
3.3.1 Luminance dans un milieu infini, purement absorbant	67
3.3.2 Approche analogue et réciprocité des chemins	69
3.3.3 Prise en compte des frontières du milieu	71
3.3.4 Échantillonnage préférentiel et approche par variance nulle	72
3.4 Étude de la luminance dans un milieu absorbant et diffusant	74
3.4.1 Luminance dans un milieu absorbant, diffusant, infini	74
3.4.2 Traitement déterministe des tests de Bernoulli	79
3.4.3 Calcul de sensibilités paramétriques	82
3.4.4 Luminance dans un milieu purement absorbant, diffusant et entouré de parois réfléchissantes	84
3.5 Étude d'une grandeur intégrée de la luminance	87
Résumé du chapitre	88

Introduction

Pour des configurations et problèmes académiques particuliers, il est possible de résoudre l'équation du transfert radiatif de façon analytique. De telles résolutions sont le plus souvent associées à des hypothèses simplificatrices concernant le modèle physique (milieu homogène, milieu optiquement mince ou épais, milieu froid, non-prise en compte des phénomènes de diffusion, *etc.*). Toutefois, dès lors que le modèle physique se complexifie (nombre de phénomènes à prendre en compte, géométrie 3D, dimension spectrale), il n'est généralement plus possible de résoudre analytiquement l'équation du transfert radiatif. Il est donc nécessaire de faire appel à des approches alternatives afin de mener à bien ce calcul. De nombreuses méthodes, d'une grande diversité (approches différentielles ou intégrales, déterministes ou stochastiques), ont été développées pour y parvenir, chacune d'entre-elles présentant ses propres avantages et inconvénients. Parmi les approches les plus usitées figurent les méthodes aux harmoniques sphériques (ou approximation P_N), les méthodes aux ordonnées discrètes, les méthodes zonales ou encore les méthodes de lancer de rayons. Des inventaires relativement complets de ces méthodes, ainsi que quelques études comparatives sont présentés dans [Siegel *et al.*, 2011, Modest, 2013].

Dans le cadre de cette thèse, le choix s'est porté sur des méthodes stochastiques de calcul intégral, dites *méthodes de Monte-Carlo*. Ce choix est motivé par plusieurs raisons. La première d'entre-elles est que ces méthodes tirent directement profit de la représentation statistique de la physique du rayonnement. Elles consistent à reproduire numériquement les modèles du transport de photons. Des allers-retours, souvent très fructueux en termes d'images et d'analyse, peuvent ainsi être faits entre les images physiques associées au transfert et les outils numériques. Les méthodes de Monte-Carlo, très appropriées à l'étude du rayonnement, sont également considérées à l'heure actuelle comme solution de référence. En effet, s'appuyant uniquement sur la formulation intégrale du transfert radiatif, elles n'induisent pas de biais lors de l'estimation d'une observable et permettent en outre d'évaluer rigoureusement et de réduire autant que nécessaire l'incertitude statistique relative à ce calcul. Les résultats obtenus sont ainsi toujours fournis avec un intervalle de confiance. Enfin, ces méthodes sont particulièrement adaptées à la gestion de la complexité (géométries complexes, fortes variations de propriétés, *etc.*) et offrent certains avantages en termes d'analyse (calcul de sensibilités paramétriques) ou même simplement de technique (parallélisation des calculs aisée).

Ce chapitre d'introduction aux méthodes de Monte-Carlo, appliquées au transfert radiatif, a pour but de poser l'ensemble des bases théoriques et techniques nécessaires à une lecture aisée de la suite du manuscrit. Un accent particulier est mis sur les liens directs existant entre les modèles statistiques du transport de photons et les outils numériques que constituent les méthodes de Monte-Carlo. En effet, au-delà de la valeur statistique de la luminance (une distribution sur l'espace des phases), les représentations que l'on se fait des interactions entre la matière et le rayonnement sont toutes probabilisées :

- la loi de Beer-Lambert n'est qu'une expression de la probabilité qu'ont des photons de parcourir une distance donnée avant d'être absorbés ou diffusés
- les albedos de diffusion simple ou d'absorption correspondent aux probabilités qu'un photon ayant collisionné en un point \mathbf{x} soit respectivement diffusé ou absorbé
- la réflectivité et l'absorptivité d'une paroi représentent les probabilités qu'un photon soit réfléchi ou absorbé par la paroi
- les fonctions de phases et distributions angulaires de réflexion correspondent aux probabilités qu'un photon initialement dans une direction \mathbf{u} diffuse ou soit réfléchi dans une direction \mathbf{u}'
- le profil de raie, lui-même, ne constitue que la probabilité d'émission ou d'absorption relative au nombre d'onde d'un photon pour une transition énergétique donnée.

La résolution de l'équation du transfert radiatif sous sa forme intégrale consistera essentiellement à moyennner ou à sommer les grandeurs relatives à ces différents événements pour estimer numériquement une observable d'intérêt. Puisque stochastiques, les méthodes de Monte-Carlo seront parfaitement adaptées à de telles considérations, bénéficiant directement de la dimension statistique de la modélisation du transport de photons.

Les deux premières sections de ce chapitre, essentiellement théoriques, comporteront de brefs rappels statistiques et introduiront les méthodes de Monte-Carlo de façon générale.

Plutôt que de poursuivre cette présentation en toute théorie, un cas d'étude radiatif sera proposé et servira d'illustration pour introduire et appliquer les concepts liés à l'étude et au calcul stochastique de grandeurs radiatives en milieu participant. Ce cas d'étude, simple au début sera progressivement complexifié de façon à introduire les différentes approches, techniques et travaux de reformulation intégrale couramment utilisés lors de l'étude du rayonnement thermique.

Nous partirons ainsi de l'étude de la luminance dans un milieu monodimensionnel infini non diffusant (Sec. 3.3). Une paroi noire sera ensuite ajoutée dans le but de présenter comment ce type de frontière peut être traité de façon statistique. Ces deux premières configurations permettront d'illustrer les concepts de réciprocité des chemins, de méthodes de Monte-Carlo analogues, et de réduction de variance.

Dans la Sec. 3.4, en plus d'émettre et d'absorber, le milieu sera considéré comme diffusant, d'abord infini puis clos par des parois réfléchissantes. La gestion de géométries tridimensionnelles ainsi que de la diffusion multiple et de la réflexion pourront être alors abordées. Ce sera également l'occasion de présenter une technique d'optimisation connue sous le nom d'*energy-partitioning* ainsi que d'aborder succinctement le calcul de sensibilités paramétriques.

Enfin, dans la Sec. 3.5, nous exprimerons et étudierons le bilan radiatif d'un petit volume de milieu participant, pour un cas très général (absorption, diffusion, émission du milieu et réflexion aux parois) dans le but de présenter la manière avec laquelle peuvent être traitées les différentes intégrales angulaire, volumique et

spectrale de la luminance.

Toutefois, nous ne nous concentrerons ici ni sur les hétérogénéités, ni sur la dépendance spectrale des propriétés radiatives. Elles feront l'objet des deux prochains chapitres.

3.1 Rappels statistiques

3.1.1 Variables aléatoires et probabilités

Avant d'aborder, à proprement parler, les méthodes de Monte-Carlo, il convient de rappeler succinctement les termes et notions statistiques sur lesquels elles s'appuient.

Variables aléatoires Une variable est dite aléatoire ou stochastique s'il n'est pas possible de déterminer à l'avance sa valeur. Celle-ci ne peut-être déterminée que par l'expérience. Les variables aléatoires sont définies sur l'ensemble des occurrences (résultats possibles de l'expérience aléatoire) et peuvent être discrètes (ex : la valeur obtenue suite à un lancer de dé 1, 2, 3, 4, 5 ou 6) ou continues (ex : la durée exacte de désintégration d'un noyau radioactif). Une fonction d'une ou de plusieurs variables aléatoires est elle-même une variable aléatoire.

Tout au long de ce manuscrit, le formalisme suivant sera adopté : les variables aléatoires seront notées en majuscules et leurs variables muettes associées en minuscules. Les *échantillons* de ces variables aléatoires - c'est-à-dire les valeurs que prennent ces variables aléatoires lors d'une expérience - seront également notés en minuscules et indicés si plusieurs expériences sont réalisées.

Probabilités, fonctions densité de probabilité Outre par l'expérience, il est possible de définir une variable aléatoire par une loi de probabilité et son domaine d'application. Cette loi est un modèle caractérisant de façon probabiliste le comportement de la variable aléatoire. Ces modèles probabilistes se doivent d'être positifs et normalisés sur leur ensemble de définition. En d'autres termes, la somme des probabilités associées à l'ensemble des éventualités doit être égale à un.

Lorsque la variable aléatoire Y est discrète et définie sur un ensemble de N_{pop} éléments, cette loi de probabilité associe à chaque élément m une *probabilité* $\mathcal{P}_Y(y_m)$. La normalisation de la somme de ces probabilités peut être formalisée comme :

$$\sum_{m=1}^{N_{pop}} \mathcal{P}_Y(y_m) = 1 \quad (3.1)$$

Lorsque la variable aléatoire X définie sur $[x_{\min}, x_{\max}]$ est continue, on qualifie cette représentation, notée $p_X(x)$, de *fonction densité de probabilité* (ou *pdf* pour "probability density function"). La quantité $p_X(x)dx$ correspond à la probabilité qu'un échantillon x_i de la variable aléatoire X soit compris dans l'intervalle dx autour

de x . La normalisation de cette fonction densité de probabilité équivaut à écrire :

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) dx = 1 \quad (3.2)$$

Les variables aléatoires et leur description statistique par les fonctions densité de probabilité constituent deux éléments essentiels à la description et à l'analyse statistique de la physique du transport, certaines d'entre-elles ont d'ailleurs été présentées dans le [Chap. 2](#).

Fonctions de répartition Enfin, le dernier élément descriptif des variables aléatoires concerne les *fonctions de répartition* (ou *cdf* pour "cumulative distribution function"). Pour une variable aléatoire continue X décrite par une fonction densité de probabilité $p_X(x)$ définie sur $[x_{\min}, x_{\max}]$, la fonction de répartition $r_X(x)$ est définie comme :

$$r_X(x) = \int_{x_{\min}}^x p_X(x') dx' \quad (3.3)$$

Cette fonction, qui est nulle pour $x = x_{\min}$ et égale à 1 pour $x = x_{\max}$, est monotone et croissante. Elle correspond à la probabilité qu'une réalisation aléatoire de la variable aléatoire X soit comprise entre x_{\min} et x .

De la même manière, pour une variable aléatoire discrète Y de probabilités $\mathcal{P}_Y(y_m)$, la fonction de répartition $R_Y(y_m)$ est définie par :

$$R_Y(y_m) = \sum_{m'=1}^m \mathcal{P}_Y(y_{m'}) \quad (3.4)$$

Des exemples de probabilités discrètes, de densités de probabilité et de fonctions de répartition sont données à la [Fig. 3.1](#).

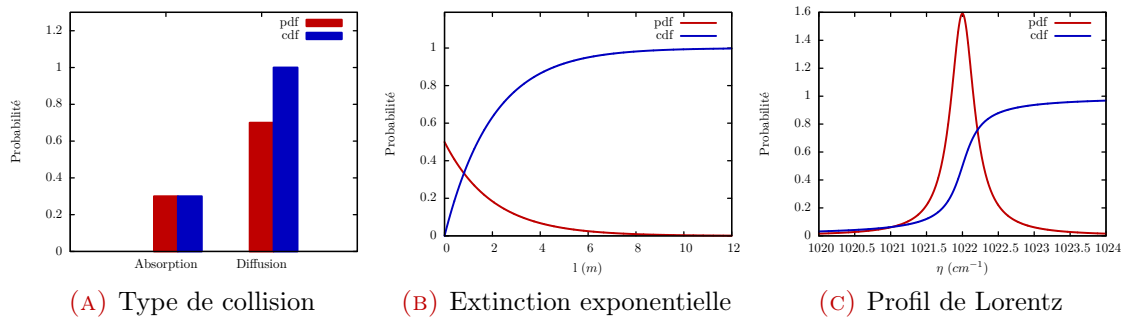


FIGURE 3.1 – Exemples de probabilités discrètes, de densités de probabilité (pdf) et de fonctions de répartition (cdf) couramment rencontrées en transfert radiatif. La figure (A) illustre les albédos d'absorption et de diffusion simple assimilables aux probabilités qu'à un photon d'être soit absorbé, soit diffusé. La figure (B) présente la densité de probabilité des libres parcours dans un milieu participant homogène. La figure (C) décrit un profil de raie Lorentzien correspondant à la densité de probabilité associée aux nombres d'onde d'émission et d'absorption de photons pour une transition moléculaire donnée.

3.1.2 Espérance, variance, écart-type et moments d'ordre supérieur à deux

Espérance - moyenne de population L'espérance d'une variable aléatoire correspond à la moyenne pondérée par sa densité de probabilité (on parle aussi de *moyenne de population*). Elle représente la valeur moyenne que l'on pourrait attendre d'une expérience aléatoire.

Pour une variable aléatoire discrète Y , son espérance est donnée par :

$$\mathbb{E}[Y] = \sum_{m=1}^{N_{pop}} \mathcal{P}_Y(y_m) y_m \quad (3.5)$$

où N_{pop} est la taille de la population, c'est-à-dire le nombre de valeurs discrètes que peut prendre Y . De la même manière, l'espérance d'une variable aléatoire continue X est définie par :

$$\mathbb{E}[X] = \int_a^b p_X(x) x dx \quad (3.6)$$

Les fonctions de variables aléatoires étant elles-mêmes des variables aléatoires, il est également possible d'exprimer leur espérance. Pour une fonction f dépendant d'une seule variable aléatoire X :

$$\mathbb{E}[f(X)] = \int_a^b p_X(x) f(x) dx \quad (3.7)$$

Si la fonction f dépend d'un nombre n de variables aléatoires, son espérance est donnée par :

$$\mathbb{E}[f(X_1, \dots, X_n)] = \int_{a_1}^{b_1} p_{X_1}(x_1) dx_1 \dots \int_{a_n}^{b_n} p_{X_n}(x_n) dx_n f(x_1, \dots, x_n) \quad (3.8)$$

Il est également possible d'exprimer l'Eq. 3.8 comme

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})] = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{X}}} p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.9)$$

en posant $\mathbf{X} = [X_1, X_2, \dots, X_n]$ et $\mathcal{D}_{\mathbf{X}} = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$. $p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ est alors appelée *fonction densité de probabilité jointe*. Si les n variables aléatoires X_i sont indépendantes elle est définie comme le produit de leur densité de probabilité respectives. Dans le cas contraire, la fonction densité de probabilité jointe est donnée par :

$$p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = p_{X_1}(x_1) \times p_{X_2|x_1}(x_2) \times \dots \times p_{X_n|(x_1, x_2, \dots, x_{n-1})}(x_n) \quad (3.10)$$

où $p_{X_j|x_{j-1}}(x_j)$ est une densité de probabilité conditionnelle qui correspond à la densité de probabilité de la variable aléatoire X_j sachant la valeur x_{j-1} .

NOTE : Caractère linéaire et projectif de l'espérance

Considérons la grandeur intégrale A définie par :

$$A = \int_{a_1}^{b_1} p_{X_1}(x_1) f \left(\int_{a_2}^{b_2} p_{X_2}(x_2) g(x_1, x_2) dx_2 \right) dx_1 \quad (3.11)$$

où $f(Z)$ est une fonction linéaire et $g(X_1, X_2)$ une fonction quelconque. Du fait de la linéarité de f il est possible de reformuler l'expression de A en :

$$A = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} p_{X_1}(x_1) p_{X_2}(x_2) f(g(x_1, x_2)) dx_2 dx_1 \quad (3.12)$$

Ainsi, il est possible d'écrire à partir des [Eq. 3.11](#) et [3.12](#) :

$$\mathbb{E} \left[f \left(\mathbb{E} [g(X_1, X_2)] \right) \right] = \mathbb{E} \left[f \left(g(X_1, X_2) \right) \right] \quad (3.13)$$

Il a donc été possible d'exprimer la grandeur intégrale A comme une espérance unique. Cette propriété est assurée par le caractère projectif et linéaire de l'opérateur espérance.

Toutefois, si la fonction $f(Z)$ n'était pas linéaire, le passage de l'[Eq. 3.11](#) à l'[Eq. 3.12](#) ne serait plus possible. On ne pourrait donc plus, dans ce cas, exprimer la grandeur A comme une simple espérance, seule l'expression

$$A = \mathbb{E} \left[f \left(\mathbb{E} [g(X_1, X_2)] \right) \right] \quad (3.14)$$

serait correcte. Comme nous allons le voir par la suite, ce caractère linéaire et projectif de l'espérance engendre de sérieuses contraintes lorsqu'il s'agit de développer des algorithmes de Monte-Carlo pour estimer des observables dont l'expression est non-linéaire. Les propositions faites aux [Chap. 4](#) et [Chap. 5](#) permettront de passer outre cette difficulté pour le cas particulier d'une fonction f exponentielle.

Variance et écart-type de population Alors que l'espérance d'une variable aléatoire correspond à son moment d'ordre 1, une seconde mesure permet de caractériser sa distribution : la *variance de population*, qui correspond au moment centré d'ordre 2. La variance de population caractérise la dispersion de la distribution de la variable considérée par rapport à son espérance. Elle est respectivement définie pour une variable aléatoire continue X et discrète Y comme

$$\begin{aligned} V(X) &= \int_a^b p_X(x) [x - \mathbb{E}[X]]^2 dx \\ &= \mathbb{E} \left[(X - \mathbb{E}[X])^2 \right] \\ &= \mathbb{E} [X^2] - (\mathbb{E}[X])^2 \end{aligned} \quad (3.15)$$

et

$$\begin{aligned}
 V(Y) &= \sum_{m=1}^{N_{pop}} \mathcal{P}_Y(y_m) [y_m - \mathbb{E}[Y]]^2 \\
 &= \mathbb{E} \left[(Y - \mathbb{E}[Y])^2 \right] \\
 &= \mathbb{E}[Y^2] - (\mathbb{E}[Y])^2
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Il sera également fréquent de rencontrer la notion d'*écart-type de population*, défini comme la racine carrée de la variance et noté σ :

$$\sigma(X) = \sqrt{V(X)} \tag{3.17}$$

Moments d'ordre supérieur à 3 Donnés ici à titre essentiellement indicatif, deux autres moments d'ordres supérieurs à 3, qualifiés *paramètres de forme*, sont souvent employés pour acquérir une information supplémentaire sur la distribution statistique des variables aléatoires.

Le premier d'entre eux, nommé *coefficient de dissymétrie*, correspond au moment centré réduit d'ordre trois de la variable aléatoire. Il caractérise l'asymétrie de la distribution d'intérêt et s'exprime comme :

$$M_3 = \mathbb{E} \left[\left(\frac{X - \mathbb{E}[X]}{\sigma(X)} \right)^3 \right] \tag{3.18}$$

Le second paramètre de forme est appelé *kurtosis*. Il correspond au moment centré réduit d'ordre quatre et caractérise l'aplatissement de la distribution. Il est donné par :

$$M_4 = \mathbb{E} \left[\left(\frac{X - \mathbb{E}[X]}{\sigma(X)} \right)^4 \right] \tag{3.19}$$

3.2 Introduction aux méthodes de Monte-Carlo

Développées à la fin des années 1940 par N. Metropolis, S. Ulam et J. Von Neumann [Metropolis et Ulam, 1949], les *méthodes de Monte-Carlo* permettent d'évaluer de façon stochastique des grandeurs intégrales. Originellement pensées pour des applications nucléaires [Metropolis, 1987], elles se sont peu à peu étendues à un grand nombre d'autres champs disciplinaires, rencontrant une résonance et un engouement tout particulier dans les domaines relatifs à la physique du transport. Parmi les nombreux ouvrages consacrés à la description de ces méthodes, nous citerons ici les deux excellentes monographies [Hammersley *et al.*, 1965] et [Dunn et Shultis, 2012] qui ont servi de point de départ et ont joué un rôle important quant aux travaux présentés dans ce manuscrit.

3.2.1 Les méthodes de Monte-Carlo : un outil stochastique de calcul intégral

Le principe des méthodes de Monte-Carlo repose sur la *loi des grands nombres*. Celle-ci énonce que la moyenne arithmétique d'un nombre important N_{mc} d'échantillons indépendants x_i d'une variable aléatoire X , converge presque sûrement vers l'espérance de cette variable aléatoire avec un nombre de réalisations N_{mc} croissant :

$$\lim_{N_{mc} \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i \right) = \mathbb{E}[X] \quad (3.20)$$

Pour un nombre N_{mc} d'échantillons suffisamment grand, la moyenne arithmétique

$$\bar{X} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i \quad (3.21)$$

constitue un estimateur non biaisé de l'espérance de X et est qualifiée de *moyenne d'échantillon*. Plus le nombre de réalisations N_{mc} sera important, plus cet estimateur sera précis.

Or, puisqu'il est toujours possible d'exprimer une formulation intégrale ou une somme comme une espérance (cf. [Eq. 3.5](#) et [Eq. 3.6](#)), les méthodes de Monte-Carlo permettent d'estimer par un processus stochastique toute grandeur pouvant être formulée sous un aspect intégral ou sommatoire. Elles consistent alors simplement à réaliser numériquement un grand nombre N_{mc} d'échantillons (ou *poids de Monte-Carlo*) indépendants x_i de la variable aléatoire X pour estimer $\mathbb{E}[X]$. La procédure d'échantillonnage sera décrite plus en détail à la [Sec. 3.2.3.1](#).

Nous distinguerons toutefois deux types de grandeurs intégrales pouvant être estimées par les méthodes de Monte-Carlo :

- les observables résultant d'un processus statistique, dont leur description est probabilisée (valeur moyenne obtenue lors d'un lancer de dé, distance moyenne à laquelle un lanceur de poids jette son projectile, *etc.*).
- les observables qui ne sont pas associées à des modèles statistiques, que nous qualifierons ici de déterministes (intégration temporelle, surfacique, volumique, *etc.*).

Observables statistiques Dans le premier cas, les observables constituent, de par les représentations que l'on en fait, de simples espérances. Elles s'exprimeront généralement sous la forme :

$$A = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{x}}} p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.22)$$

où \mathbf{x} est un vecteur aléatoire de densité de probabilité $p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ défini sur $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$ et f une fonction quelconque. En transfert radiatif, les grandeurs mésoscopiques (en

particulier la luminance) constitueront des observables de ce type. Les algorithmes de Monte-Carlo correspondants consisteront donc à échantillonner un grand nombre de fois la variable $f(\mathbf{X})$ et à moyenner arithmétiquement ces valeurs pour obtenir une estimation non biaisée de A . Ils peuvent donc être perçus comme une reproduction numérique et stochastique de l'expérience aléatoire d'intérêt. Il sera directement possible, dans ce cas précis, de tirer une analogie entre le modèle statistique et l'outil numérique. Deux exemples élémentaires (pour une variable discrète et une variable continue) sont donnés dans l'encadré ci-dessous.

EXEMPLE : Méthodes de Monte-Carlo pour une observable statistique

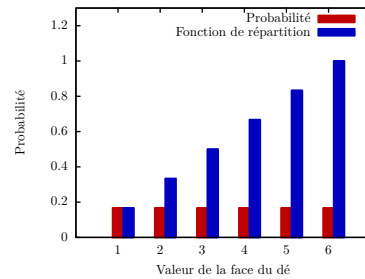
Lancer de dé. Attachons-nous à estimer par un algorithme de Monte-Carlo l'espérance de la valeur obtenue Y lors d'un lancer de dé. Le modèle posé admet que la probabilité que le dé tombe sur n'importe laquelle de ses 6 faces m est identique : $\mathcal{P}_Y(y_m) = 1/6$ (hypothèse d'équiprobabilité, voir figure de droite). L'espérance de la valeur obtenue Y est donnée par :

$$\mathbb{E}[Y] = \sum_{m=1}^6 \mathcal{P}_Y(y_m) y_m = \frac{1}{6}(1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6) = 3.5 \quad (3.23)$$

L'algorithme de Monte-Carlo permettant d'estimer cette espérance consiste alors à réaliser un grand nombre d'échantillons indépendants y_i de la variable Y . En d'autres termes, cela consiste à lancer de façon numérique et indépendante un grand nombre de fois N_{mc} le dé et de stocker les valeurs obtenues : les échantillons de Y ou poids de Monte-Carlo. L'estimation non biaisée \tilde{Y} de $\mathbb{E}[Y]$ est alors donnée par :

$$\tilde{Y} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} y_i \quad (3.24)$$

Dans ce cas précis, le développement d'un algorithme de Monte-Carlo n'est pas pertinent puisque $\mathbb{E}[Y]$ est analytiquement calculable, mais dès que l'observable d'intérêt sera plus complexe les méthodes de Monte-Carlo s'avéreront particulièrement adaptées.

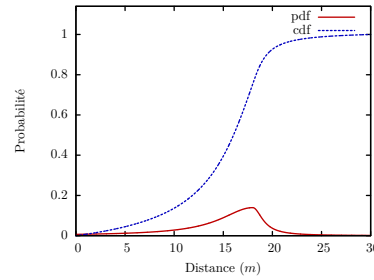


Lanceur de poids. Pour illustrer le cas d'une variable aléatoire continue, considérons désormais l'espérance de la distance X à laquelle un lanceur de poids jette son projectile. Supposons également que ce sportif soit très constant et qu'un modèle probabiliste de X ait été fait : la variable X est décrite selon une densité de probabilité $p_X(x)$ (voir figure de droite). L'espérance de X s'exprime alors comme :

$$\mathbb{E}[X] = \int_0^{+\infty} p_X(x)x dx \quad (3.25)$$

Dans ce cas aussi, l'algorithme de Monte-Carlo consistera à échantillonner un grand nombre de fois la variable X selon la densité de probabilité $p_X(x)$. L'estimation de la distance moyenne à laquelle est jetée le poids sera alors donnée par :

$$\tilde{X} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i \quad (3.26)$$



Pour aborder des problèmes de ce type, deux approches sont alors possibles : l'une basée sur le formalisme intégral et statistique de la grandeur d'intérêt ; l'autre sur une analogie avec l'expérience aléatoire et les images véhiculées par le modèle statistique sous-jacent. Ces deux approches, présentées plus en détail à la [Sec. 3.3.2](#), sont respectivement qualifiées d'approches *intégrales* et *analogues*.

Observables intégrales déterministes Les méthodes de Monte-Carlo ne se limitent toutefois pas à estimer des observables ayant une valeur statistique. Elles peuvent être également utilisées pour estimer des intégrales ou des sommes n'ayant aucun modèle statistique sous-jacent (le calcul d'une aire par exemple, voir encadré ci-dessous). Dans le domaine du transfert radiatif, on rencontrera ce type d'observables dès lors que l'on s'attachera à des grandeurs macroscopiques ou intégrées spectralement. Pour illustrer ce cas, considérons l'estimation de la grandeur A définie comme :

$$A = \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} f(b) db \quad (3.27)$$

où b est une variable à laquelle aucune image statistique n'est associée. Les méthodes de Monte-Carlo ne pouvant estimer que des espérances, il est nécessaire de reformuler l'expression de A pour se ramener à un formalisme du type de celui de l'[Eq. 3.6](#). Pour ce faire, une fonction densité de probabilité $p_B(b)$ (positive et normalisée sur $[b_{\min}, b_{\max}]$) doit être introduite de façon totalement arbitraire. L'[Eq. 3.27](#) est alors reformulée en :

$$A = \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} p_B(b) \frac{f(b)}{p_B(b)} db = \mathbb{E} \left[\frac{f(B)}{p_B(B)} \right] \quad (3.28)$$

On vient ainsi de rendre statistique un problème en apparence déterministe. L'algorithme de Monte-Carlo correspondant consiste alors à réaliser un grand nombre

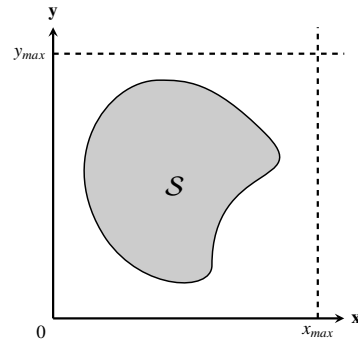
N_{mc} d'échantillons b_i de la variable aléatoire B selon $p_B(b)$ et à calculer les poids de Monte-Carlo $f(b_i)/p_B(b_i)$ correspondants. Une estimation de la grandeur A est alors donnée par :

$$\tilde{A} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \frac{f(b_i)}{p_B(b_i)} \quad (3.29)$$

EXEMPLE : Méthodes de Monte-Carlo pour une observable déterministe

Calcul de l'aire d'un lac. Supposons que l'on souhaite estimer la surface \mathcal{S} d'un lac (schématisée par la figure de droite), situé dans un champ rectangulaire de cotés $[0, x_{\max}]$ et $[0, y_{\max}]$. Cette surface peut être exprimée par l'expression intégrale

$$\mathcal{S} = \int_0^{x_{\max}} \int_0^{y_{\max}} \mathcal{H}(\{x, y\} \in \mathcal{S}) dy dx \quad (3.30)$$



où $\mathcal{H}(\{x, y\} \in \mathcal{S})$ est une fonction de Heaviside valant 1 si le jeu de coordonnées $\{x, y\}$ appartient au lac et valant 0 dans le cas contraire. Pour traiter ce problème par Monte-Carlo, il convient d'introduire des densités de probabilité $p_X(x)$ et $p_Y(y)$ arbitraires, de sorte à pouvoir exprimer cette surface comme l'espérance d'une variable aléatoire :

$$\mathcal{S} = \int_0^{x_{\max}} p_X(x) \int_0^{y_{\max}} p_Y(y) \frac{\mathcal{H}(\{x, y\} \in \mathcal{S})}{p_X(x)p_Y(y)} dy dx = \mathbb{E} \left[\frac{\mathcal{H}(\{X, Y\} \in \mathcal{S})}{p_X(X)p_Y(Y)} \right] \quad (3.31)$$

L'algorithme de Monte-Carlo correspondant consiste donc pour un grand nombre de fois N_{mc} à échantillonner de façon indépendante une abscisse x_i et une ordonnée y_i . Si le point $[x_i, y_i]$ appartient au lac, le poids de Monte-Carlo est alors défini comme $w_i = 1/(p_X(x)p_Y(y))$, dans le cas contraire $w_i = 0$. L'estimation de la surface du lac est alors donnée par la moyenne arithmétique des N_{mc} poids w_i . Le problème en apparence déterministe a ainsi été traité de façon statistique.

Il est possible de se créer des images statistiques associées à cette reformulation. En supposant que l'échantillonnage des positions se fasse de façon uniforme sur la surface du champ (lac compris), le rapport entre le nombre de positions échantillonnées dans le lac et le nombre total de positions générées constitue bien une estimation du ratio entre la surface du lac et celle du champ.

Pour une intégrale simple, l'intérêt des méthodes de Monte-Carlo reste assez limité. Des méthodes numériques de quadrature existent et sont souvent très précises et rapides pour évaluer une telle expression. Cependant, dès lors que les problèmes se complexifieront (intégrales multiples, domaines de définition ou géométries complexes), les méthodes de Monte-Carlo se révéleront particulièrement adaptées. Une fois l'observable d'intérêt exprimée comme une simple espérance, elle pourra

être estimée par un unique algorithme de Monte-Carlo, quel que soit le degré de complexité de sa formulation intégrale. À l'inverse des méthodes numériques, la difficulté de résolution et les temps de calcul associés seront peu dépendants du nombre de dimensions de l'espace d'intégration. Seule la variable aléatoire ayant la plus forte variance conditionnera le niveau de convergence de l'algorithme.

Quel que soit le type d'observable que l'on souhaite estimer par des méthodes de Monte-Carlo, on mesure alors l'importance d'exprimer le problème sous la forme d'une espérance de variable aléatoire. Tout au long de ce manuscrit, nous nous efforcerons donc de formaliser l'observable d'intérêt à partir de sa formulation intégrale sous une expression statistique de la forme $\mathbb{E}[W(\mathbf{X})]$, où $W(\mathbf{X})$ est qualifiée de variable aléatoire poids. Ce ne sera que dans un second temps, que l'algorithme de Monte-Carlo correspondant sera présenté. Les formulations intégrales et statistiques occupent dans notre pratique des méthodes de Monte Carlo une place essentielle. Le poids de Monte Carlo $W(\mathbf{X})$, dont l'espérance est l'observable que l'on souhaite estimer, correspond à la variable aléatoire échantillonnée par l'algorithme (chaque échantillon $w_i(\mathbf{x}_i)$ correspond à la valeur obtenue à la fin d'une réalisation indépendante). De plus, uniquement à partir des formulations intégrales, il est directement possible de concevoir l'algorithme de Monte Carlo correspondant. Chaque terme $\int_{\mathcal{D}_x} p_X(x) dx$ ou $\sum_{m=1}^{N_{pop}} P_Y(y_m)$ présents dans l'expression intégrale se traduisent respectivement de façon numérique par une procédure d'échantillonnage de la variable aléatoire continue X selon la densité de probabilité $p_X(x)$ ou de la variable discrète Y selon les probabilités $P_Y(y_m)$ et chaque terme récursif se traduit algorithmiquement par une boucle. Nous verrons par la suite que l'essentiel du travail d'amélioration de ces méthodes stochastiques réside dans la reformulation de ces expressions intégrales et statistiques, modifiant en conséquence les modèles statistiques et les structures algorithmiques associés.

3.2.2 Estimation de l'erreur statistique

En plus de pouvoir estimer une grandeur intégrale, les méthodes de Monte-Carlo permettent d'évaluer l'incertitude de cette estimation, les plaçant ainsi dans la famille des solutions de référence. Cette propriété repose sur le *théorème central limite* qui énonce que toute somme de variables aléatoires identiquement distribuées et indépendantes tend vers une variable aléatoire distribuée selon une gaussienne. Ce théorème implique donc que la distribution de l'estimation d'une grandeur obtenue par un algorithme de Monte-Carlo, qui est elle-même une variable aléatoire, tend vers une distribution gaussienne lorsque le nombre de réalisations indépendantes N_{mc} augmente. Il est alors possible d'interpréter son écart-type comme une erreur statistique.

Si l'on souhaite évaluer une grandeur $A = \mathbb{E}[X]$ par un algorithme de Monte-Carlo, l'estimation de A est donnée par la moyenne d'un nombre important d'échantillons de X :

$$\tilde{A} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i \quad (3.32)$$

et l'estimation non biaisée de l'écart-type de \tilde{A} est donnée par :

$$s(\tilde{A}) = \sqrt{\frac{1}{N_{mc}(N_{mc} - 1)} \sum_{i=1}^{N_{mc}} (x_i - \tilde{A})^2} \quad (3.33)$$

Des démonstrations de cette expression sont données dans [Hammersley *et al.*, 1965, Dunn et Shultis, 2012]. Pour des considérations purement numériques, une écriture alternative de cet écart-type est généralement préférée :

$$s(\tilde{A}) = \sqrt{\frac{1}{N_{mc}(N_{mc} - 1)} \left(S_2 - \frac{S_1^2}{N_{mc}} \right)} \quad (3.34)$$

où $S_1 = \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i$ et $S_2 = \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i^2$. Il sera ainsi possible d'incrémenter les valeurs de S_1 et S_2 , après chacune des N_{mc} réalisations. Cela permet de calculer $s(\tilde{A})$ à l'aide d'une seule série d'échantillons sans la nécessité d'estimer \tilde{A} dans un premier temps (comme le laisserait penser l'Eq. 3.33) ou même de réaliser un grand nombre d'estimations de A pour connaître l'écart-type associé à ces estimations.

La grandeur $s(\tilde{A})$ porte le nom d'*écart-type d'échantillon* de l'estimation de Monte-Carlo. Elle permet de définir, à partir de la loi normale, un intervalle de confiance $[\tilde{A} - \beta s, \tilde{A} + \beta s]$ (où β est une valeur positive) autour de l'estimation \tilde{A} , dans lequel il y a une certaine probabilité que la grandeur d'intérêt A soit incluse (on parle d'*indice de confiance*). La Tab. 3.1 illustre pour plusieurs valeurs de β ¹ les indices de confiance associés.

Intervalle de confiance	Indice de confiance
$[\tilde{A} - 1s, \tilde{A} + 1s]$	68.27%
$[\tilde{A} - 2s, \tilde{A} + 2s]$	95.45%
$[\tilde{A} - 3s, \tilde{A} + 3s]$	99.73%
$[\tilde{A} - 5s, \tilde{A} + 5s]$	99.99994%

TABLE 3.1 – Intervalles de confiance de la loi normale. Ce tableau doit être lu de la façon suivante : il y a une probabilité de 68.27% que la grandeur d'intérêt A soit comprise dans l'intervalle $[\tilde{A} - 1s, \tilde{A} + 1s]$.

3.2.3 Les méthodes de Monte-Carlo en pratique

Dans cette dernière sous-section, nous aborderons les aspects techniques inhérents au développement de méthodes de Monte-Carlo. Les procédures d'échantillonnage, les méthodes d'évaluation de la précision et de la qualité des résultats ainsi qu'un inventaire succinct des techniques de réduction de variance seront ainsi abordés.

1. Par convention, les résultats obtenus par des méthodes de Monte-Carlo sont donnés avec un intervalle de confiance $[\tilde{A} - 1s, \tilde{A} + 1s]$ et sont illustrés graphiquement par des barres d'erreurs.

3.2.3.1 Échantillonnage

Il est aujourd'hui aisé de générer numériquement des nombres pseudo-aléatoires de façon uniforme² [James, 1990, Dunn et Shultis, 2012]. Il est toutefois plus difficile d'échantillonner de façon stochastique une variable aléatoire dont la densité de probabilité n'est pas uniforme.

Dans la pratique, pour produire un échantillon x_i d'une variable aléatoire continue X définie sur $[x_{\min}, x_{\max}]$, on échantillonne de façon uniforme un nombre réel r_i entre 0 et 1 et on résout l'équation suivante :

$$r_i = \int_{x_{\min}}^{x_i} f(x) dx \quad (3.35)$$

Cela revient à inverser la fonction de répartition pour obtenir une valeur de x_i à partir de r_i (une illustration graphique de cette procédure est donnée Fig. 3.2a). Cette manipulation est possible grâce au caractère monotone et croissant des fonctions de répartition. Il est en effet possible de tirer une bijection entre deux fonctions de répartition : la première, associée à une densité de probabilité uniforme (échantillonnage de r_i) et la seconde, associée à la fonction densité de probabilité d'intérêt (échantillonnage de x_i).

Il est également fréquent de rencontrer, dans les formulations statistiques, des variables aléatoires discrètes (par exemple pour distinguer une absorption d'une diffusion). Lorsqu'une telle variable aléatoire, notée Y , n'admet que deux valeurs possibles y_a et y_b , de probabilités respectives \mathcal{P}_a et \mathcal{P}_b validant $\mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b = 1$, la procédure d'échantillonnage est qualifiée de *test de Bernoulli*. Elle consiste à tirer de façon aléatoire et uniforme un nombre r_i entre 0 et 1. Deux cas sont alors possibles :

- soit $0 < r_i < \mathcal{P}_a$, alors l'échantillon de la variable Y généré est $y_{a,i}$
- soit $\mathcal{P}_a < r_i < \mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b = 1$, alors l'échantillon de la variable Y généré est $y_{b,i}$

Dans le cas où ces variables aléatoires discrètes admettent un nombre $N_{pop} > 2$ de valeurs possibles notées y_m de probabilités \mathcal{P}_m , leur procédure d'échantillonnage est qualifiée de *roulette russe*. Le principe est identique au test de Bernoulli : un nombre aléatoire r_i est tiré aléatoirement de façon uniforme entre 0 et 1, $y_{1,i}$ est échantillonné si $r_i < \mathcal{P}_{1,i}$; autrement l'échantillon $y_{g,i}$ généré doit valider l'équation :

$$\sum_{m=1}^{g-1} \mathcal{P}_{m,i} < r_i < \sum_{m=1}^g \mathcal{P}_{m,i} \quad (3.36)$$

Il est possible de considérer les tests de Bernoulli et roulettes russes comme une simple extension de l'inversion des fonctions de répartition aux variables aléatoires discrètes. Leurs probabilités sont alors assimilées à une succession de Diracs centrés aux valeurs discrètes y_m (voir Fig. 3.2b).

2. Tout au long de cette thèse, nous utiliserons comme générateur pseudo-aléatoire *ranlxd2* inclus dans la *GNU Scientific Library* (<http://www.gnu.org/software/gsl/>). Ce générateur de haute qualité est une implémentation de l'algorithme RANLUX de Lüscher [Lüscher, 1994, James, 1994].

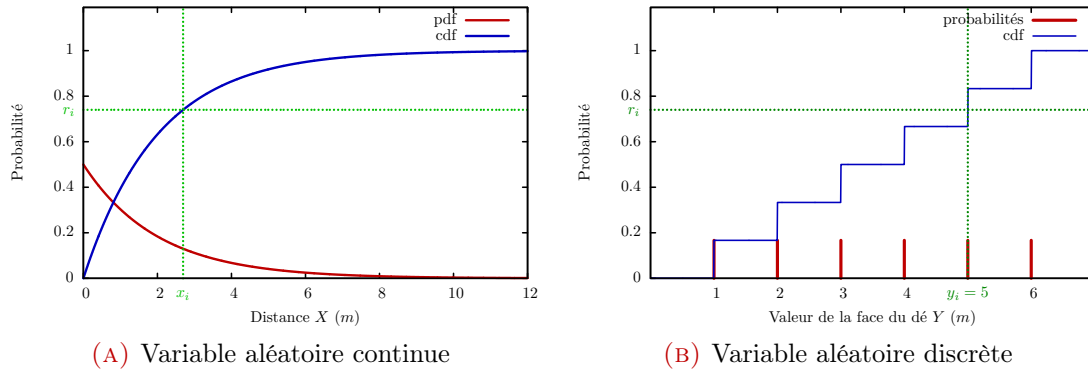


FIGURE 3.2 – Procédure d'échantillonnage d'une variable aléatoire continue X (A) et discrète Y (B). L'échantillonnage de x_i et y_i consiste à générer de façon aléatoire et uniforme un nombre r_i et d'inverser la fonction de répartition de la variable aléatoire d'intérêt.

3.2.3.2 Précision et qualité des résultats

Les méthodes de Monte-Carlo sont, par nature, des méthodes non biaisées. Aux incertitudes de modèle près, dès que l'algorithme est une traduction stochastique rigoureuse de l'observable d'intérêt, ces méthodes ne nécessitent pas d'approximation et ne sont à l'origine d'aucune erreur ou biais numérique. Toutefois, puisque les estimations reposent sur un processus aléatoire, elles sont elles-mêmes des variables aléatoires. Il convient alors de s'assurer de leur validité et de leur représentativité statistique. Pour ce faire, plusieurs indicateurs et techniques existent pour évaluer à quel point une estimation \tilde{A} est fidèle et proche de la grandeur d'intérêt A . Ces mesures statistiques et leur analyse constituent une étape très importante lors du développement de méthodes de Monte-Carlo.

Erreur relative Le premier indicateur est l'*erreur relative* (ou *écart-type relatif*) notée $e(\tilde{A})$. Elle est définie comme le rapport entre l'écart-type de l'estimation $s(\tilde{A})$ et l'estimation elle-même :

$$e(\tilde{A}) = \frac{s(\tilde{A})}{\tilde{A}} \quad (3.37)$$

Cette mesure, souvent exprimée en pourcentage, permet de quantifier la précision statistique de l'estimation \tilde{A} . Plus faible sera l'erreur relative, plus précise sera l'estimation de la grandeur d'intérêt. Dans [X-5 Monte Carlo Team, 2008], les auteurs considèrent qu'un bon résultat est une estimation ayant une erreur relative inférieure à 5%. De façon plus générale, si l'erreur relative est supérieure à 10%, il est couramment entendu que l'on ne peut pas réellement accorder de confiance aux résultats obtenus. Il est alors nécessaire d'augmenter le nombre de réalisations N_{mc} indépendantes pour diminuer l'écart-type d'échantillon et ainsi passer en dessous de ce seuil. L'écart-type d'échantillon $s(\tilde{A})$ étant proportionnel à $\frac{1}{\sqrt{N-1}}$, il est nécessaire de réaliser 4 fois plus de réalisations pour diviser par deux l'erreur relative.

Une pratique courante permettant d'évaluer la qualité de l'estimation consiste à relancer l'algorithme de Monte-Carlo avec 100 fois plus d'estimations. L'erreur

relative doit être 10 fois plus faible et les deux estimations obtenues pour N_{mc} et $100N_{mc}$ réalisations doivent correspondre (aux intervalles de confiance près). Il est également possible de tracer l'évolution de l'estimation et de l'erreur relative en fonction du nombre de réalisations. L'estimation doit converger vers une valeur et l'erreur relative doit être proportionnelle à l'inverse d'une fonction racine carrée. Si tel n'est pas le cas, cela signifie que le comportement statistique de l'algorithme n'est pas correctement maîtrisé et que des événements dits rares ont eu lieu.

Les *événements rares* sont des événements ayant une probabilité d'occurrence très faible mais une contribution à l'estimation par Monte-Carlo non négligeable. Ces événements ont une réelle valeur statistique et doivent être échantillonnés pour que la simulation ne soit pas biaisée (un exemple élémentaire est fourni dans l'encadré ci-dessous). Cependant, il est souvent très complexe de les identifier et de traiter les problèmes de convergence qu'ils engendrent, tout en conservant des temps de calcul acceptables. De tels événements, généralement peu fréquents, ont été rencontrés lors des travaux présentés dans ce manuscrit. Leur prise en compte sera détaillée dans les chapitres suivants.

EXEMPLE : Événements rares

Pour illustrer les problèmes de convergence qu'entraînent les événements rares, prenons l'exemple d'une loterie pour laquelle, sur un million de tickets vendus, seul un est gagnant avec une valeur d'un million d'euros. Si l'on souhaite estimer, par des méthodes de Monte-Carlo, l'espérance du gain (qui est de $10^6/10^6 = 1\text{€}$), il est nécessaire d'échantillonner un grand nombre de fois la variable aléatoire associée au gain d'un ticket. Tant qu'aucun ticket gagnant n'est échantillonné, l'estimation de Monte-Carlo est de 0€ , avec une erreur relative nulle. Mais si l'on échantillonne 1000 tickets de façon uniforme dont un ticket gagnant, l'estimation est alors de 1000€ et l'erreur relative de 100% . Dans les deux cas, les résultats obtenus ne sont pas satisfaisants. Il est alors nécessaire de réaliser un très grand nombre de réalisations pour obtenir une erreur relative acceptable (environ 10^9 réalisations pour passer en dessous de 5%).

Temps de calcul pour une erreur relative de 1% Le temps de calcul ou le nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur relative de 1% constituent des indicateurs permettant de caractériser la performance d'un algorithme particulier. Ils sont souvent utilisés dans le but de comparer deux variantes algorithmiques données. En supposant que la statistique du problème est bien prise en compte par l'algorithme, l'erreur relative est proportionnelle à l'inverse de la racine carrée du nombre de réalisations. Le nombre de réalisations $N_{mc,1\%}$ nécessaire pour obtenir une erreur relative de 1% peut alors être estimé par l'expression

$$N_{mc,1\%} = N_{mc} \left(\frac{e(\tilde{A})}{1\%} \right)^2 \quad (3.38)$$

où $e(\tilde{A})$ est l'erreur relative estimée par un algorithme constitué de N_{mc} réalisations indépendantes. De la même façon, le temps de calcul $t_{1\%}$ nécessaire pour obtenir une erreur relative de 1% est donné par :

$$t_{1\%} = t \left(\frac{e(\tilde{A})}{1\%} \right)^2 \quad (3.39)$$

où t est le temps de calcul d'une simulation ayant conduit à une erreur relative $e(\tilde{A})$. Bien que le temps de calcul à 1% dépende du processeur avec lequel a été réalisée la simulation, nous privilégierons cet indicateur par la suite, car il permet de donner un ordre de grandeur des temps de calcul caractéristiques, obtenus grâce aux méthodes proposées.

Enfin, il est courant de rencontrer dans la littérature une autre grandeur appelée *facteur de mérite* et notée FOM . Elle est définie comme :

$$FOM = \frac{1}{\left(e(\tilde{A}) \right)^2 t} \quad (3.40)$$

où $e(\tilde{A})$ est l'erreur relative et t le temps de calcul nécessaire pour parvenir à cette erreur relative. Excepté en début de simulation où le bruit statistique est important, le facteur de mérite doit être à peu près constant quel que soit le nombre de réalisations. Cette grandeur est également fréquemment utilisée pour comparer deux variantes algorithmiques : plus elle est importante, plus l'algorithme est performant.

Variance de la variance Enfin, pour des cas où l'on suspecte de mauvais comportements statistiques des variables aléatoires, il peut être souhaitable de calculer des moments d'ordre supérieur (kurtosis et facteur de dissymétrie, définis à la [Sec. 3.1.2](#)). Ces grandeurs sont beaucoup plus sensibles³ à des comportements pathologiques que l'erreur relative ou autres moments d'ordre 2. Plus ils seront proches de zéro, plus la distribution de l'estimation sera proche d'une gaussienne, et donc plus les résultats et leur écart-type seront fiables.

Plutôt que de calculer le kurtosis ou le facteur de dissymétrie, une troisième mesure statistique est généralement préférée : la *variance de la variance* [[Pederson, 1991](#), [X-5 Monte Carlo Team, 2008](#), [Cho, 2008](#), [Vegas-Sánchez-Ferrero et al., 2012](#)]. Cette grandeur relative permet d'obtenir une information sur le niveau de confiance que l'on peut placer dans la variance d'échantillon de l'estimation obtenue par Monte-Carlo.

3. Même si les moments d'ordres supérieurs à 2 sont plus sensibles aux variations statistiques, ils ne permettent évidemment pas d'identifier des événements rares qui n'auraient pas été échantillonnées.

Celle-ci peut être estimée à partir de l'expression

$$VOV = \frac{S_4 - \frac{4}{N_{mc}} S_1 S_3 + \frac{8}{N_{mc}^2} S_2 S_1^2 - \frac{4}{N_{mc}^3} S_1^4 - \frac{1}{N_{mc}} S_2^2}{\left(S_2 - \frac{1}{N_{mc}} S_1^2\right)^2} \quad (3.41)$$

où $S_1 = \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i$, $S_2 = \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i^2$, $S_3 = \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i^3$ et $S_4 = \sum_{i=1}^{N_{mc}} x_i^4$. La variance de la variance est proportionnelle à l'inverse du nombre de réalisations. Puisque plus sensible que la variance aux événements rares, il peut être intéressant de tracer son évolution en fonction du nombre de réalisations et de voir si elle est bien linéaire. Dans [X-5 Monte Carlo Team, 2008], les auteurs considèrent par expérience, que l'intervalle de confiance d'une estimation peut être admis comme fiable si la variance de la variance est inférieure à 10%.

3.2.3.3 Techniques de réduction de variance

Comme introduit précédemment, les méthodes de Monte-Carlo permettent d'associer un intervalle de confiance à toute estimation. Cependant, si l'on souhaite réduire cet intervalle de confiance d'un facteur n , il est nécessaire de réaliser n^2 fois plus de réalisations indépendantes, ce qui peut s'avérer particulièrement lourd. Une autre façon pour réduire la variance associée à l'estimation (et a fortiori le temps de calcul) consiste à repenser le problème statistique d'intérêt. Plusieurs techniques existent pour réduire les écarts-types d'échantillons sans avoir à recourir à un nombre plus important de réalisations indépendantes. Des inventaires relativement complets de ces méthodes sont dressés dans [Hammersley *et al.*, 1965, De La Torre *et al.*, 2014, Dunn et Shultis, 2012]. Tout au long de ce manuscrit, nous utiliserons trois principales techniques dites de réduction de variance : l'*échantillonnage préférentiel*, l'*approche par variance nulle* et la *reformulation intégrale*.

Échantillonnage préférentiel Dans la section [Sec. 3.2.1](#), il a été montré comment une observable en apparence déterministe pouvait être repensée de façon statistique : par l'introduction de densités de probabilité arbitraires. Le choix de ces probabilités, bien que libre, n'est toutefois pas anodin, il jouera un rôle sur la convergence numérique de l'algorithme. Pour toute formulation intégrale (ou toute somme), il est alors possible d'introduire de la même façon une densité de probabilité (ou un jeu de probabilités discrètes) de façon à modifier la statistique des phénomènes d'intérêt. Prenons l'exemple d'une grandeur A définie comme :

$$A = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) f(x) dx = \mathbb{E}[f(X)] = \mathbb{E}[W(X)] \quad (3.42)$$

Il est toujours possible d'insérer dans cette expression une nouvelle densité de probabilité $\tilde{p}_X(x)$ totalement arbitraire :

$$A = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \tilde{p}_X(x) \left[\frac{p_X(x)}{\tilde{p}_X(x)} f(x) \right] dx = \mathbb{E} \left[\frac{p_X(X)}{\tilde{p}_X(X)} f(X) \right] = \mathbb{E} [\tilde{W}(X)] \quad (3.43)$$

modifiant ainsi la variable aléatoire échantillonnée par l'algorithme de Monte-Carlo. Celle-ci, à l'origine définie comme $W(X) = f(X)$ et décrite par $p_X(x)$, est désormais donnée par $\tilde{W}(X) = \frac{p_X(X)}{\tilde{p}_X(X)} f(X)$ et est associée à la distribution arbitraire $\tilde{p}_X(x)$. Un choix adéquat de cette densité de probabilité peut ainsi conduire à une réduction de la variance de l'estimation

$$\tilde{A} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \frac{p_X(x_i)}{\tilde{p}_X(x_i)} f(x_i) \quad (3.44)$$

obtenue par le nouvel algorithme de Monte-Carlo.

Approche par variance nulle Plutôt que de choisir de façon totalement arbitraire une nouvelle densité de probabilité, il est possible de recourir à une approche dite par variance nulle, décrite dans [Assaraf et Caffarel, 1999, Hoogenboom, 2008, De La Torre *et al.*, 2014, Dauchet *et al.*, 2013]. Cette approche consiste à exprimer la densité de probabilité qui assurerait que toutes les valeurs de la variable aléatoire échantillonnée par l'algorithme de Monte-Carlo soient identiques et égales à la grandeur d'intérêt. Dans le cas présenté ci-dessus, la densité de probabilité idéale serait donnée par :

$$\tilde{p}_{X,\theta}(x) = \frac{p_X(x)f(x)}{A} = \frac{p_X(x)f(x)}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x')f(x')dx'} \quad (3.45)$$

Cette expression ne peut cependant pas être utilisée en tant que telle puisqu'elle dépend de l'observable d'intérêt A que l'on souhaite estimer. Toutefois, s'il est possible d'établir un modèle approché de $\frac{p_X(x)f(x)}{A}$ suffisamment représentatif de la physique en présence, la nouvelle densité de probabilité devrait assurer une variance de l'estimation relativement faible. L'échantillonnage préférentiel et l'approche variance nulle seront illustrés pour des problématiques radiatives à la [Sec. 3.3.4](#).

Reformulation intégrale Enfin, la reformulation intégrale consiste à repenser totalement le problème statistique pour parvenir à une réécriture intégrale de l'observable d'intérêt. Ainsi, le nouvel algorithme de Monte-Carlo estime l'espérance d'une nouvelle variable aléatoire, qui est susceptible selon les choix de reformulation d'avoir une variance plus faible. Chaque travail de reformulation doit être pensé pour l'observable et la configuration d'intérêt (changement de variables, inversion de l'ordre et des intégrales, modification des espaces d'intégration, *etc.*). Aussi, il est difficile d'en faire ici un inventaire exhaustif, mais cette propriété offerte par les méthodes de Monte-Carlo sera employée à plusieurs reprises dans la suite du manuscrit.