

Contents

1	Introduction	2
2	Modèle de Malkmus	2
2.1	Du monochromatique au polychromatique	2
2.2	Distributions déterministes de raies de Lorentz	3
2.2.1	Largeur équivalente pour une raie seule	4
2.2.2	Ensemble de raies de Lorentz non recouvrantes	4
2.3	Distribution aléatoire de raies de Malkmus	5
2.3.1	Processus ponctuels et mesures aléatoires de comptage.	6
2.3.2	Processus ponctuels binomiaux (PPB)	6
2.3.3	Processus ponctuels de Poisson (PPP)	7
2.3.4	Processus ponctuel décrivant le modèle de Malkmus	9
2.3.5	Formule de la fonctionnelle de Laplace et loi de Malkmus	10
2.3.6	Identification des paramètres	13
3	Simulations Monte Carlo de la transmittivité moyenne du gaz	14
3.1	Raie Lorentzienne unique	14
3.2	Distribution statistique de raies	15
4	Conclusion	19

Préambule

Ce document fait suite à une séance de travail au tableau avec Najda, Frédéric et Lamine. L'objectif est d'étudier la transmittivité d'une colonne d'atmosphère en s'appuyant sur le modèle statistique de Malkmus et de formaliser une approche de Monte Carlo permettant de retrouver ses résultats théoriques. Cette approche pourrait ensuite être mise en œuvre dans des schémas radiatifs atmosphériques 1D ou 3D couplés à des systèmes thermiques complexes (interaction ville/atmosphère par exemple dans MC2).

1 Introduction

Le spectre d'absorption de l'atmosphère terrestre contient des millions de raies d'absorption, en grande partie situées dans l'infrarouge, les principaux gaz absorbant étant la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone et l'ozone. Les calculs radiatifs raie par raie sont donc particulièrement lourds mais il existe de nombreuses approches permettant de réduire cette complexité avec une perte de précision contrôlée. On peut citer en particulier les modèles de bandes qui décrivent la transmission atmosphérique sur des bandes de fréquences contenant un grand nombre de raies. Moyennant des hypothèses sur les formes de raies et leurs distributions d'intensité notamment, il est possible de dériver des expressions analytiques de la transmittivité moyenne par bande de fréquence. C'est le cadre du modèle de Malkmus qu'on commencera par expliciter, en s'inspirant largement du document scanné de Richard et des thèses de Frédéric et Nicolas, pour le réinvestir ensuite dans une démarche probabiliste de Monte Carlo.

2 Modèle de Malkmus

Le cadre général est le suivant : on considère un gaz homogène contenu dans une colonne de longueur l dont on cherche à déterminer la transmittivité moyenne dans une bande de fréquence $\Delta\nu$ centrée sur ν_0 . La luminance incidente L_i a un spectre plat.

2.1 Du monochromatique au polychromatique

Si la bande de fréquence $\Delta\nu$ est suffisamment faible pour que le coefficient d'absorption du gaz puisse être considéré comme constant égal à $k(\nu_0)$, on écrit directement la transmittivité moyenne :

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \tau_{\nu_0}(l) = \exp(-\bar{k}l) = \exp(-k(\nu_0)l) \quad (1)$$

C'est une approche "exhaustive" qui suppose de connaître $k(\nu_0)$, donc la contribution de chaque raie à chaque fréquence (valeurs tabulées dans des bases de données comme HITRAN).

Pour réduire le coût de calcul, on élargit la bande de fréquence $\Delta\nu$, il n'est plus possible alors de considérer le coefficient d'absorption comme constant.

Raies faibles : Beer Lambert. Dans le modèle de Beer Lambert, on garde simplement l'expression de la transmittivité :

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \tau(\nu) d\nu = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp(-k(\nu)l) d\nu = \exp(-\bar{k}l)$$

avec $\bar{k} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} k(\nu) d\nu$. Ce modèle est valide tant que les raies sont "faibles", c'est-à-dire que le gaz est optiquement mince pour ces raies. Dans ce cas, en effet, on peut linéariser l'exponentielle $\tau(\nu) = \exp(-k(\nu)l) = 1 - k(\nu)l$ et l'on retrouve bien $\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \exp(-\bar{k}l)$. Sur la Figure 1 par exemple la raie peut être considérée comme une raie faible pour la longueur 1.

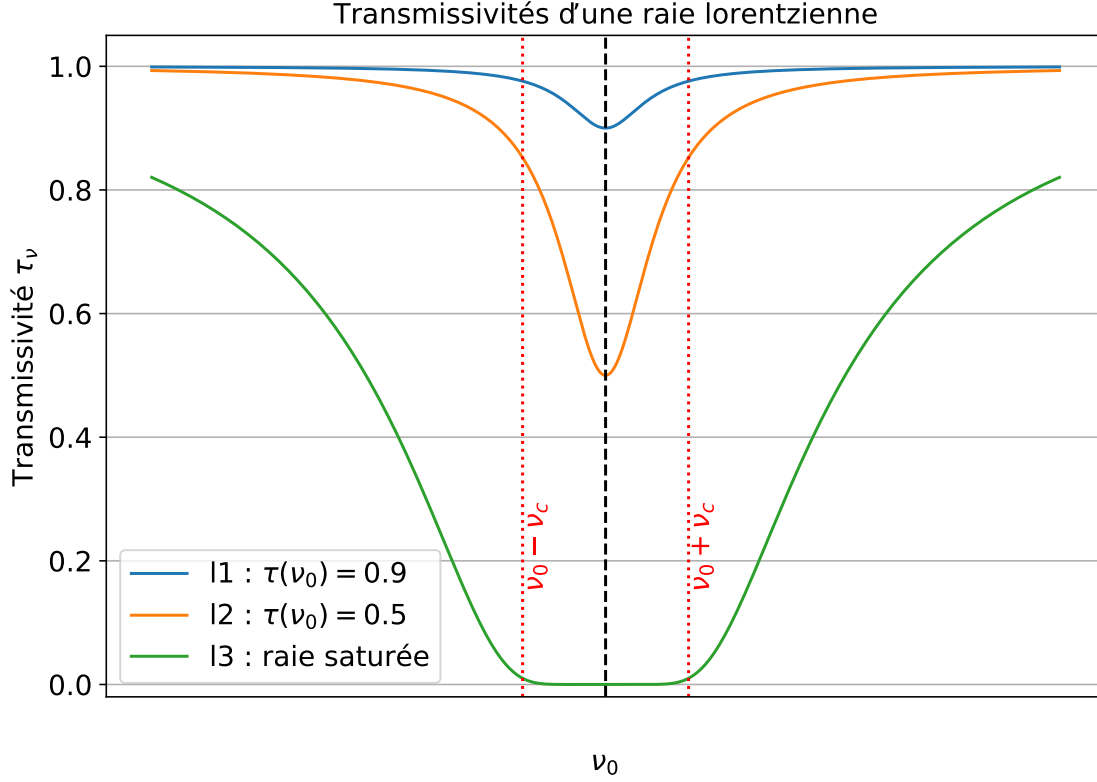


Figure 1: transmittivité d'une même raie de Lorentz pour différentes valeurs de la longueur de gaz traversée.

Raies fortes : saturation. Dès qu'il y a des raies fortes en revanche, on observe un phénomène de saturation, extinction au niveau des fréquences centrales des raies, et il ne reste que la contribution des ailes de raie dans la transmittivité. Par exemple pour une longueur l typique de 100 m (maille d'un modèle atmosphérique global par exemple), et un coefficient d'absorption typique de 10 m^{-1} au centre d'une raie, on a $kl = 10^3$, le centre de raie est donc totalement éteint. Sur la Figure 1, la raie est saturée pour la longueur 3, dans ce cas l'exponentielle n'est plus linéarisable et l'on a :

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \tau(\nu) d\nu \neq \exp(-\bar{k}l)$$

Notons que la notion de raie faible et forte dépend de la longueur de gaz traversée.

L'objectif des modèles de type Malkmus est d'établir une expression analytique de $\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)}$ cohérente avec les limites faibles et fortes tout en conservant la forme exponentielle de Beer Lambert.

2.2 Distributions déterministes de raies de Lorentz

Dans le modèle de Malkmus, les raies sont supposées être Lorentzienne :

$$k(\nu) = SF(\nu - \nu_0) = \frac{S}{\pi} \frac{b}{(\nu - \nu_0)^2 + b^2} \quad (2)$$

Où S est l'intensité de la raie et b sa demi-largeur à mi-hauteur. D'autres formes de raies ont été envisagées dans d'autres travaux (Fels, Zhu) conduisant à des expressions analytiques différentes mais le principe reste le même. On se restreint ici à des raies Lorentziennes et on commence par établir quelques résultats analytiques utiles dans le cadre de distributions déterministes, i.e non aléatoires, de raies.

2.2.1 Largeur équivalente pour une raie seule

On suppose dans un premier temps qu'il n'y a qu'une seule raie de Lorentz absorbante dans la bande de fréquence considérée et que la bande est suffisamment large pour qu'on puisse la considérer comme infinie à l'échelle de cette raie :

$$\int_{\Delta\nu} F(\nu - \nu_0) d\nu = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu - \nu_0) d\nu = 1$$

On définit la largeur de raie équivalente qui sera utile par la suite pour dériver le modèle de Malkmus :

$$W(l) = \int_{-\infty}^{\infty} [1 - \exp(-k(\nu)l)] d\nu = \int_{\Delta\nu} [1 - \exp(-k(\nu)l)] d\nu \quad (3)$$

Pour une luminance incidente plate L_i , on peut alors écrire la luminance transmise intégrée sur la bande de fréquence $\Delta\nu$:

$$L_{t,\Delta\nu}(l) = \int_{\Delta\nu} L_i \exp(-k(\nu)l) d\nu = \Delta\nu L_i (1 - \frac{W(l)}{\Delta\nu}) \quad (4)$$

$W(l)$ apparaît donc comme la largeur d'une raie rectangulaire totalement absorbante ayant le même effet absorbant que la raie considérée sur cette longueur l . Pour une raie unique, on identifie sans difficulté :

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = 1 - \frac{W(l)}{\Delta\nu} \quad (5)$$

Il est possible par ailleurs, dans le cas d'une raie de Lorentz, d'écrire une expression analytique de $W(l)$ à l'aide de fonctions de Bessel :

$$W(l) = 2\pi bL \left(\frac{Sl}{2\pi b} \right), \quad (6)$$

où L est la fonction $L(x) = x \exp(-x)[I_0(x) + I_1(x)]$ avec I_0 et I_1 les premières fonctions de Bessel modifiées.

On s'intéresse tout de suite aux deux limites de $W(l)$ pour une raie de Lorentz faible puis pour une raie de Lorentz forte. Ces deux limites serviront de référence pour choisir les paramètres du modèle.

Limite pour une raie faible Dans la limite des raies faibles, on linéarise $1 - \exp(-k(\nu)l) = k(\nu)l$ et on obtient :

$$W_{faible}(l) = Sl \quad (7)$$

Limite pour une raie forte Le calcul de $W_{fort}(l)$ est un peu plus complexe. Le principe est de remarquer que pour toute raie, il existe une longueur de gaz au-delà de laquelle on peut considérer que $\nu_c \gg b$ où ν_c est la demi-largeur de saturation de la raie (Fig. 1) et b sa demi-largeur à mi-hauteur. La limite raie forte peut alors être estimée en séparant l'intégration fréquentielle entre la partie saturée et non saturée. On obtient alors :

$$W_{fort}(l) = 2\sqrt{bS} \cdot \sqrt{l} \quad (8)$$

Remarque : pour que ce calcul reste valable dans une bande de fréquence $\Delta\nu$ il faut que l'absorption de la raie soit négligeable en dehors de cette bande. Quand l devient très grand, il faut éventuellement augmenter $\Delta\nu$ en conséquence, W devant forcément rester inférieur à $\Delta\nu$.

2.2.2 Ensemble de raies de Lorentz non recouvrantes

On considère maintenant une bande de fréquence contenant N raies de Lorentz $k_i(\nu)$ d'intensité S_i , de demi-largeur b_i et de centre ν_i différentes mais ne se recouvrant pas (Fig. 2). L'hypothèse de non recouvrement implique qu'à chaque fréquence ν il n'y a qu'une seule raie absorbante au maximum. Autrement dit, il est possible de partitionner l'intervalle d'intégration $\Delta\nu$ en N intervalles $\Delta\nu_i$ ne contenant chacun qu'une seule

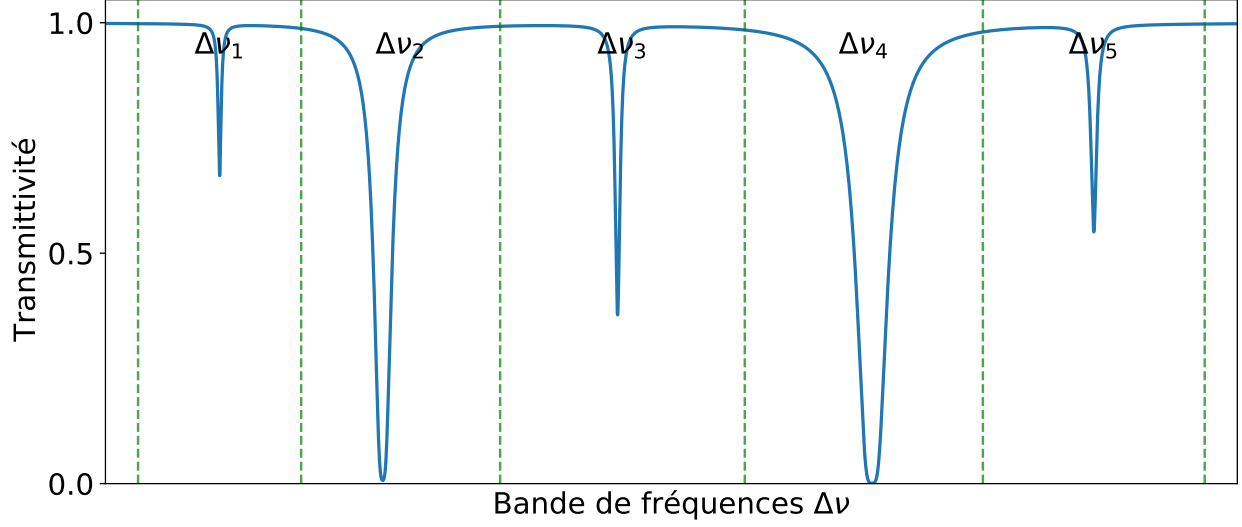


Figure 2: transmittivité d'un ensemble de raies non recouvrantes.

raie centrée en ν_i . De plus chaque intervalle $\Delta\nu_i$ est suffisamment large pour pouvoir être considéré comme infini à l'échelle de la raie qui s'y trouve.

Sous ces hypothèses, les résultats du paragraphe précédent restent valables dans chaque intervalle $\Delta\nu_i$. Et la largeur équivalente de l'ensemble des raies se découpe de façon simple :

$$W(l) = \int_{\Delta\nu} [1 - \exp(-k(\nu)l)] d\nu = \sum_{i=1}^N \int_{\Delta\nu_i} [1 - \exp(-k_i(\nu)l)] d\nu = \sum_{i=1}^N W_{ri}(l),$$

où $W_{ri}(l)$ est la largeur équivalente de la raie i . Les limites faibles et fortes s'écrivent alors :

$$W_{faible}(l) = l \sum_{i=1}^N S_i \quad (9)$$

et

$$W_{fort}(l) = 2\sqrt{l} \sum_{i=1}^N \sqrt{b_i S_i} \quad (10)$$

Ces expressions, comparées aux limites faibles et fortes obtenues pour une raie seule, invitent à considérer une intensité équivalente $\bar{S} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i$ et une demi-largeur à mi-hauteur équivalente $\bar{b} = \frac{1}{\bar{S}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N b_i S_i \right)^2$ par raie. Ces grandeurs correspondent à l'intensité et à la demi-largeur à mi-hauteur d'un ensemble de raies identiques ayant les mêmes limites faibles et fortes. Ce cadre limite de faible recouvrement sera réutilisé par la suite pour identifier les paramètres du modèle de Malkmus.

2.3 Distribution aléatoire de raies de Malkmus

Dans le modèle de Malkmus on est amené à modéliser l'ensemble des raies d'absorption du gaz par une distribution statistique pour éviter de calculer individuellement la contribution de chaque raie. L'espace des états associé à une raie est bidimensionnel $E = I_\nu \times \mathbb{R}_+^*$, où I_ν désigne l'intervalle spectral considéré de largeur $\Delta\nu$. Chaque raie est ainsi caractérisée par une fréquence centrale $\nu \in I_\nu$ et une intensité $S \in \mathbb{R}_+^*$, toutes deux distribuées aléatoirement selon des lois à préciser. La demi-largeur à mi-hauteur b^* en revanche est supposée identique pour toutes les raies et constitue un paramètre fixe du modèle. Cette hypothèse

permet notamment d'obtenir des expressions analytiques simples pour la transmittivité. Les paramètres du modèle — ceux décrivant les distributions des fréquences et des intensités ainsi que la valeur de b^* — peuvent ensuite être ajustés à partir des données spectrales dans les limites faibles et fortes comme dans le paragraphe précédent. Pour établir le modèle aléatoire de Malkmus, on propose ici une démarche originale qui ne reprend pas la démonstration classique avec des familles de raies identiques indépendantes (notion délicate à mon sens dans le contexte de distributions aléatoires). Cette démarche se déroule dans le cadre des mesures aléatoires de comptage et permettra d'exhiber la loi de Malkmus à l'aide d'un seul théorème. Bien qu'il n'était pas encore entièrement formalisé à l'époque des travaux de Malkmus, il constitue maintenant le cadre mathématique naturel pour l'étude des configurations ponctuelles aléatoires en physique statistique. On peut ainsi traiter dans un même formalisme les configurations des particules d'un gaz (ensemble canonique ou grand canonique) ou les raies d'absorption d'un spectre, ces différents systèmes pouvant être décrits comme des configurations aléatoires de points dans un espace d'états approprié.

2.3.1 Processus ponctuels et mesures aléatoires de comptage.

Un processus ponctuel X sur un espace d'états mesurable E muni de sa tribu borélienne est un processus stochastique à sauts dont chaque réalisation est un ensemble de points isolés $(\{x_i\}_{i \in I}, x_i \in E)$ appelé configuration. Ici $E = I_\nu \times \mathbb{R}_+^*$, correspond aux différentes raies possibles du système. Dans les situations usuelles, cet ensemble de points est localement fini, et donc constitué d'un nombre fini ou dénombrable de points. A chaque configuration $\{x_i\}_{i \in I}$ on peut naturellement associer une mesure de comptage :

$$m = \sum_{i \in I} \delta_{x_i} \quad (11)$$

où δ est la mesure de Dirac. Un processus ponctuel peut donc être interprété comme une variable aléatoire M à valeur dans $\mathcal{M}^{\text{atom}}(E)$ l'ensemble des mesures atomiques, sommes dénombrables de mesures de Dirac. Cette variable aléatoire $M = \sum_{i \in I} \delta_{x_i}$ est appelée mesure aléatoire de comptage et une réalisation m de cette variable aléatoire fournit une description totalement équivalente d'une configuration donnée. m étant une mesure de comptage, pour chaque borélien B de E , le nombre de points appartenant à B d'une configuration est donc donné par :

$$\#\{i \in I : x_i \in B\} = m(B) \quad (12)$$

où $\#$ désigne le cardinal. On définit alors la notion de mesure intensité μ du processus ponctuel, ou de la mesure aléatoire de comptage, comme l'espérance de sa mesure aléatoire de comptage M . Ainsi pour tout borélien B de E :

$$\mu(B) = \mathbb{E}[M(B)] \quad (13)$$

Cette mesure intensité décrit donc, pour tout borélien B , l'espérance du nombre de points appartenant à B pour ce processus ponctuel. La mesure intensité d'un processus ponctuel est entièrement caractérisée par sa densité ρ lorsque celle-ci existe, ce qui est généralement le cas en physique. Elle représente le nombre moyen de points (ici de raies) par unité de volume dans l'espace des états $E = I_\nu \times \mathbb{R}_+^*$.

$$\mu(d\nu, dS) = \rho(\nu, S) d\nu dS. \quad (14)$$

2.3.2 Processus ponctuels binomiaux (PPB)

Les processus ponctuels binomiaux (PPB) sont les processus ponctuels pour lesquels le nombre de point total $N \in \mathbb{N}$ de chaque configuration est fixé. On supposera par ailleurs que ces points sont répartis de manière indépendante et identiquement distribuée dans l'espace d'état selon la mesure donnée M d'intensité μ . Le nombre de points tombant dans un borélien $B \subset E$ est alors donné par

$$M(B) = \#\{i \in \{1, \dots, N\} : X_i \in B\}.$$

Les variables indicatrices $\mathbf{1}_{X_i \in B}$ sont donc i.i.d. de loi de Bernoulli de paramètre $\mu(B)$ et on obtient :

$$M(B) \sim \text{Binomial}(N, \mu(B)), \quad \mathbb{E}[M(B)] = N \mu(B). \quad (15)$$

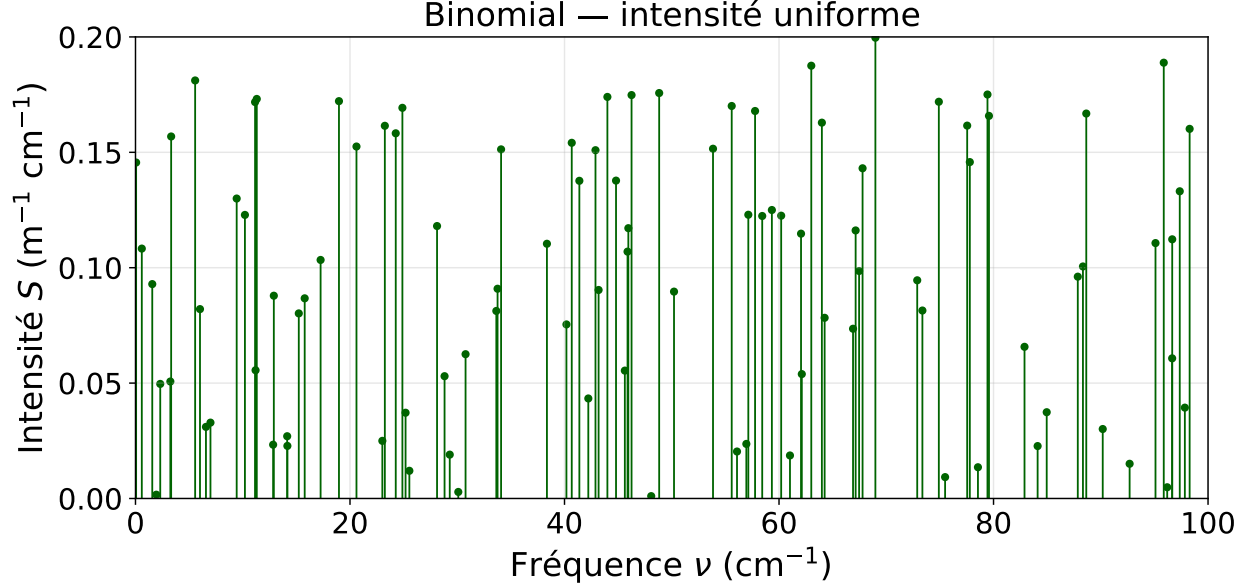


Figure 3: Réalisation d'un processus ponctuel binomial avec mesure intensité uniforme ($N=100$).

C'est le cadre correspondant à l'ensemble canonique en physique statistique par exemple.

Sur la figure 3 est représentée une réalisation d'un PPB sur $E = I_\nu \times \mathbb{R}_+^*$ de mesure intensité uniforme $\mu_N(d\nu, dS) = \frac{1}{\delta} \frac{d\nu dS}{S_{\max}}$ où $\delta = \frac{\Delta\nu}{N} = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $S_{\max} = 0.20 \text{ m}^{-1} \text{ cm}^{-1}$.

La figure 4 représente une réalisation d'un PPB sur $E = I_\nu \times \mathbb{R}_+^*$ de mesure intensité exponentielle pour l'intensité et uniforme pour la fréquence $\mu_N(d\nu, dS) = \frac{1}{\delta} \frac{1}{S^*} e^{-S/S^*} d\nu dS$ où $\delta = \frac{\Delta\nu}{N} = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $S^* = 0.20 \text{ m}^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Dans tout ce qui suit, les mesures intensités seront uniformes en fréquence sur l'intervalle $\Delta\nu$. Le paramètre $\delta = \frac{\Delta\nu}{N}$ représente l'intervalle de fréquence moyen entre deux raies (à condition que le terme dépendant de l'intensité soit normalisée).

2.3.3 Processus ponctuels de Poisson (PPP)

On note $\mathcal{M}^{*,+}(E)$, l'ensemble des mesures s-finies de E . Une mesure est dite s-finie lorsqu'il existe un recouvrement dénombrable de E par des ensembles de mesures finies. Autrement dit E peut s'écrire comme réunion dénombrable d'ensembles de mesures finies. La mesure de E peut en revanche être infinie, ce qui aura son importance dans le modèle de Malkmus. Une mesure aléatoire de Poisson (MAP), ou processus ponctuel de Poisson (PPP) de mesure $\mu \in \mathcal{M}^{*,+}(E)$ est une variable aléatoire M à valeurs dans $\mathcal{M}^{\text{atom}}(E)$, telle que pour toute famille finie de boréliens $(A_j)_{j \in J}$, les variables $(M(A_j))_{j \in J}$ suivent des lois de Poisson indépendantes de paramètres $(\mu(A_j))_{j \in J}$. Si l'on prend un borélien B seul par exemple, $M(B)$ suit la loi de Poisson de paramètre $\mu(B)$.

Par rapport aux processus ponctuels binomiaux, où le nombre de points N est fixé et où la mesure d'un borélien suit une loi binomiale, les processus ponctuels de Poisson généralisent ce cadre en laissant le nombre total de points aléatoire. Dans ce cas, pour une même mesure intensité μ donnée, la variable $M(B)$ suit une loi de Poisson de paramètre $\mu(B)$ pour tout borélien B . C'est le cadre correspondant à l'ensemble grand canonique en physique statistique. On peut noter que pour des grandes valeurs de N , la mesure aléatoire binomiale converge vers la mesure aléatoire de Poisson de même intensité comme la loi binomiale converge vers la loi de Poisson. Ceci permet d'ailleurs de retrouver l'équivalence des ensembles canonique et grand canonique pour un grand nombre de particules.

Sur les figures 5 et 6 sont présentées deux réalisations d'un PPP de mesure uniforme et d'un PPP de mesure exponentielle avec les mêmes paramètres que les PPB précédents. Le nombre de points de la

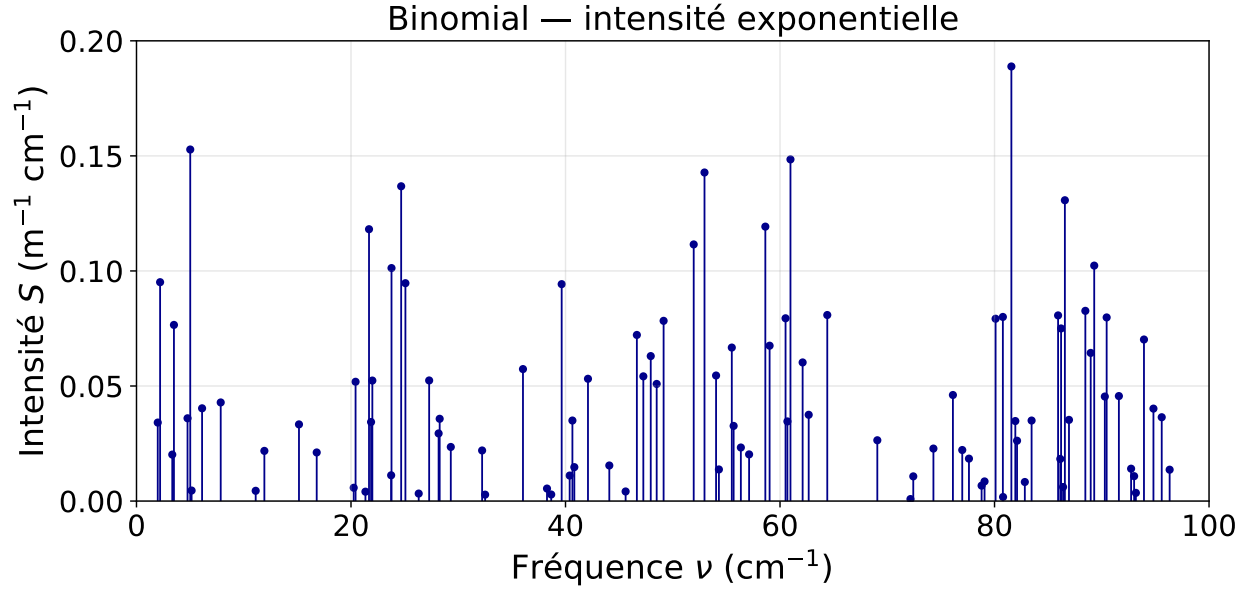


Figure 4: Réalisation d'un processus ponctuel binomial avec mesure intensité exponentielle ($N=100$). La figure est tronquée à $S_{\max} = 0.20 \text{ m}^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Il peut donc manquer certains points.

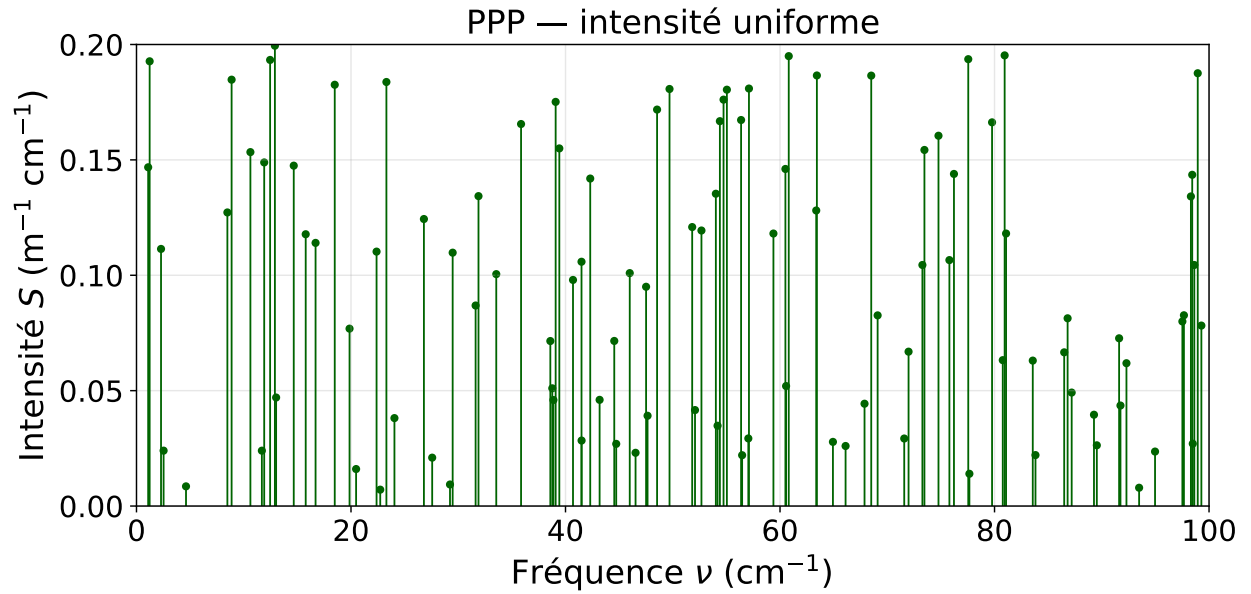


Figure 5: Réalisation d'un processus ponctuel de Poisson avec mesure intensité uniforme ($N=105$).

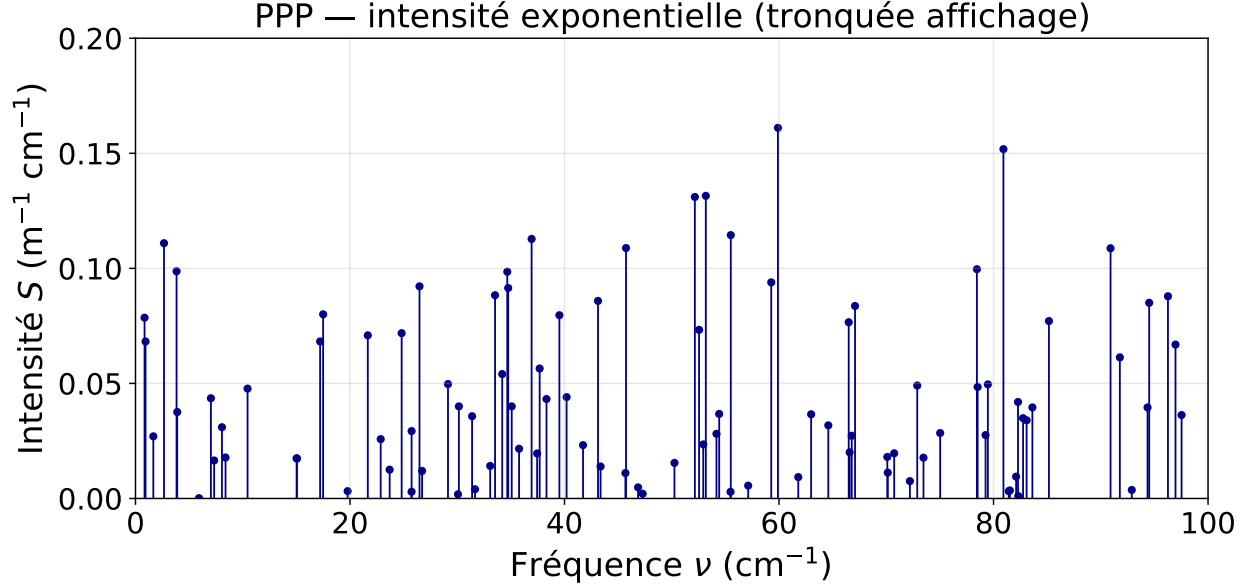


Figure 6: Réalisation d'un processus ponctuel de Poisson avec mesure intensité exponentielle ($N=101$). La figure est tronquée à $S_{\max} = 0.20 \text{ m}^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Il peut donc manquer certains points.

configuration est tiré aléatoirement selon une loi de poisson de paramètre $N = 100$, on obtient 105 points pour le premier et 101 pour le second.

2.3.4 Processus ponctuel décrivant le modèle de Malkmus

Dans le modèle de Malkmus, le nombre de raies dans chaque bande de fréquence est très grand, les descriptions par un processus binomial ou de Poisson sont donc équivalentes. On choisira ici la description par un PPP car elle donne accès à la formule de la fonctionnelle de Laplace, qui permettra de retrouver la loi de Malkmus en un seul geste. La densité de raies est donné via le paramètre δ dont l'interprétation sera discutée par la suite. Il ne reste donc qu'à définir la mesure intensité choisie par Malkmus pour obtenir une description complète du PPP :

$$\mu(d\nu, dS) = \frac{1}{\delta} \rho(S) d\nu dS \quad (16)$$

avec

$$\rho(S) = \frac{1}{S} e^{-S/S^*} \quad (17)$$

A première vue cette mesure ressemble beaucoup à la mesure exponentielle mais la présence de S au dénominateur au lieu de S^* la distingue en fait très nettement. Il en résulte que le nombre de raies par décade est constant pour les petites intensités $S \ll S^*$. De ce fait, la mesure est infinie sur $\mathbb{R}_+^*$ et non normalisable. En revanche cette mesure reste s-finie car on peut recouvrir $\mathbb{R}_+^*$ par un ensemble d'intervalles $[\frac{1}{n}, \infty[$ ($n \in \mathbb{N}$) de mesures finies. On pourra donc utiliser les outils de la théorie des PPP, en particulier la formule de la fonctionnelle de Laplace.

Pour simuler un processus ponctuel avec une mesure de Malkmus infinie, il est donc nécessaire de réaliser une troncature en intensité. C'est d'ailleurs ce que propose Malkmus pour donner un sens physique à son modèle puisqu'il ne peut pas y avoir une infinité de raies. En revanche le formalisme analytique, lui, repose sur une vision non tronquée de la distribution. Il sera donc impossible de retrouver exactement la loi de Malkmus par une simulation de Monte Carlo, contrairement au cas exponentiel pur.

L'échantillonnage de l'intensité S suivant la mesure de Malkmus est réalisé par la méthode de rejet décrite dans l'encadré. La figure 7 montre un exemple de configuration obtenue pour cette mesure avec les mêmes

paramètres que précédemment. La différence avec la mesure exponentielle est flagrante avec un très grand nombre de raies de "petites" intensité et quelques rares raies intenses.

Méthode de rejet pour la loi de Malkmus tronquée

On souhaite échantillonner une variable de densité cible f , à partir d'une densité de proposition g facile à échantillonner et d'une constante $M > 0$ telles que

$$f(x) \leq M g(x), \quad \forall x.$$

L'algorithme de rejet est le suivant :

1. tirer $X \sim g$,
2. tirer $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$,
3. accepter X si

$$U \leq \frac{f(X)}{M g(X)}.$$

Dans le cas de la loi de Malkmus tronquée sur $[S_{\min}, S_{\max}]$, on peut normaliser $\rho(S) = \frac{1}{S} e^{-S/S^*}$ pour obtenir une mesure de probabilité f :

$$f(S) = \frac{1}{C} \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{S}{S^*}\right)$$

et choisir

$$g(S) = \frac{1}{\ln(S_{\max}/S_{\min})} \frac{1}{S}$$

où C est la constante de normalisation de ρ et g est une loi log-uniforme que l'on échantillonnera. Le rapport

$$\frac{f(S)}{g(S)} = \frac{\ln(S_{\max}/S_{\min})}{C} \exp\left(-\frac{S}{S^*}\right)$$

est alors décroissant et permet de choisir

$$M = \frac{\ln(S_{\max}/S_{\min})}{C} \exp\left(-\frac{S_{\min}}{S^*}\right),$$

et la probabilité d'acceptation devient

$$\frac{f(X)}{M g(X)} = \exp\left(-\frac{S - S_{\min}}{S^*}\right).$$

2.3.5 Formule de la fonctionnelle de Laplace et loi de Malkmus

On admettra le théorème suivant, parfois appelé formule de la fonctionnelle de Laplace ou formule de Campbell :

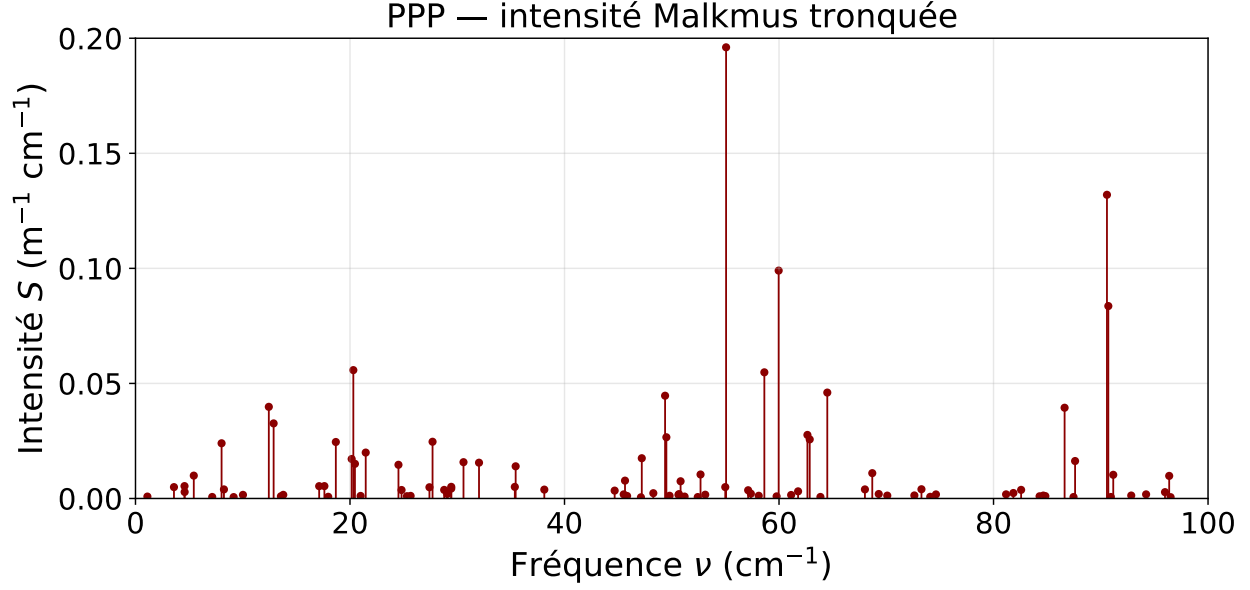


Figure 7: Réalisation d'un processus ponctuel de Poisson avec mesure intensité de Malkmus (N=95).

Soit M une mesure aléatoire de Poisson d'intensité μ sur $(E, \mathcal{E})$. Pour toute fonction mesurable $f : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, la quantité

$$M(f) = \int_E f(x) M(dx)$$

définit une variable aléatoire. De plus, on a :

$$\mathbb{E}[\exp(-M(f))] = \exp\left(-\int_E (1 - e^{-f(x)}) \mu(dx)\right).$$

Dans le modèle statistique de raie, on peut écrire le coefficient d'absorption k à l'aide de la mesure aléatoire de Poisson $M = \sum_i \delta_{(\nu_i, S_i)}$ de mesure intensité μ de Malkmus :

$$k(\nu) = \int_E S F(\nu - \nu') M(d\nu', dS) = \sum_i S_i F(\nu - \nu_i), \quad (18)$$

k , ν_i et S_i étant des variables aléatoires. L'espérance de la transmittivité $\tau_\nu(l)$ à la fréquence ν n'est alors rien d'autre que la fonctionnelle de Laplace du processus ponctuel de malkmus évalué en la fonction $f_\nu(\nu', S) = S F(\nu - \nu')l$. Elle s'obtient alors directement à partir de la formule de la fonctionnelle de Laplace appliquée à cette fonction:

$$\mathbb{E}[\tau_\nu(l)] = \mathbb{E}[\exp(-k(\nu)l)] = \exp\left(-\int_E (1 - e^{-f_\nu(x)}) \mu(dx)\right). \quad (19)$$

L'intégrale du membre de droite de l'équation 19 s'écrit alors:

$$\int_E (1 - e^{-f_\nu(x)}) \mu(dx) = \frac{1}{\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \left(1 - e^{-SF(\nu - \nu')l}\right) \frac{e^{-S/S^*}}{S} dS d\nu' = \frac{\widetilde{W}}{\delta}, \quad (20)$$

où $\widetilde{W}$ est interprété dans la plupart des travaux comme une largeur équivalente moyenne de raie en considérant que la densité ρ est une densité de probabilité. Cette interprétation est source de confusion car

l'intégration est faite contre une mesure non normalisée. Elle conduit à des développements périlleux puisqu'elle est généralement multipliée par le nombre de raies N dans les calculs ultérieurs. On propage alors une erreur de normalisation dans toutes les interprétations physiques, de l'écart entre les raies δ jusqu'au coefficient d'absorption "moyen". Si l'on veut garder l'image d'une largeur équivalente moyenne de raie, il faudrait diviser la mesure par un facteur de normalisation (dépendant de la troncature S_{min} , donc assez malcommode) qui viendrait alors s'immiscer jusque dans la formule de Malkmus ou dans tous les interprétations physiques. En particulier -et c'est un point assez subtil- qui peut totalement fausser les calculs de Monte Carlo- si l'on souhaite conserver l'interprétation de δ comme la distance moyenne entre les raies, il faut nécessairement introduire le facteur de normalisation dans la formule finale de Malkmus. Dans ce travail le choix a été fait de ne pas alourdir la loi de Malkmus avec cette constante, ce qui oblige à adapter l'interprétation de δ . Quoi qu'il en soit cette intégrale, qui n'est pas l'espérance de la largeur équivalente, peut être calculée analytiquement avec une légère correction par rapport à tous les travaux précédents (voir encadré ci-dessous) :

$$\widetilde{W} = 2\pi \left(\sqrt{b^{*2} + \frac{b^* l S^*}{\pi}} - b^* \right) = 2\pi b^* \left(\sqrt{1 + \frac{l S^*}{\pi b^*}} - 1 \right) \quad (21)$$

Détail du calcul de la largeur moyenne de raie équivalente

On calcule d'abord l'intégrale en intensité :

$$\int_0^{+\infty} \left(1 - e^{-SF(\nu-\nu')l} \right) \frac{e^{-S/S^*}}{S} dS = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-S/S^*} - e^{-S(F(\nu-\nu')l + \frac{1}{S^*})}}{S} dS.$$

Par la formule de Frullani :

$$\int_0^{+\infty} \frac{e^{-ax} - e^{-bx}}{x} dx = \ln\left(\frac{b}{a}\right), \quad a, b > 0,$$

on obtient :

$$\int_0^{+\infty} \left(1 - e^{-SF(\nu-\nu')l} \right) \frac{e^{-S/S^*}}{S} dS = \ln(1 + F(\nu - \nu') l S^*).$$

Puis on intègre sur les fréquences :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \ln(1 + F(\nu - \nu') l S^*) d\nu' = \int_{-\infty}^{+\infty} \ln(1 + F(u) l S^*) du.$$

Pour une lorentzienne de demi-largeur b^* et en notant $A = \frac{b l S^*}{\pi}$, on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \ln\left(\frac{u^2 + b^{*2} + A}{u^2 + b^{*2}}\right) du = 2\pi(\sqrt{b^{*2} + A} - b^*).$$

Ce calcul est à vérifier scrupuleusement car il y a un facteur 4 de différence avec le calcul de Malkmus original et toutes les publications qui le mentionnent. En revanche en estimant numériquement l'intégrale -voir figure 8- on obtient un excellent accord avec ce nouveau calcul et un écart important (facteur 2 dont on peut se convaincre par développement limité) avec celui de Malkmus pour les grandes valeurs de l .

On constate que $\widetilde{W}$, et donc l'espérance de la transmittivité, ne dépendent pas de la fréquence d'observation ν . En effet, dans l'hypothèse d'une bande suffisamment large pour contenir un grand nombre de raies réparties uniformément en fréquence, chaque fréquence d'observation voit en moyenne la même distribution de raies, de sorte qu'aucune fréquence n'est statistiquement privilégiée. Cette propriété est rigoureusement valable

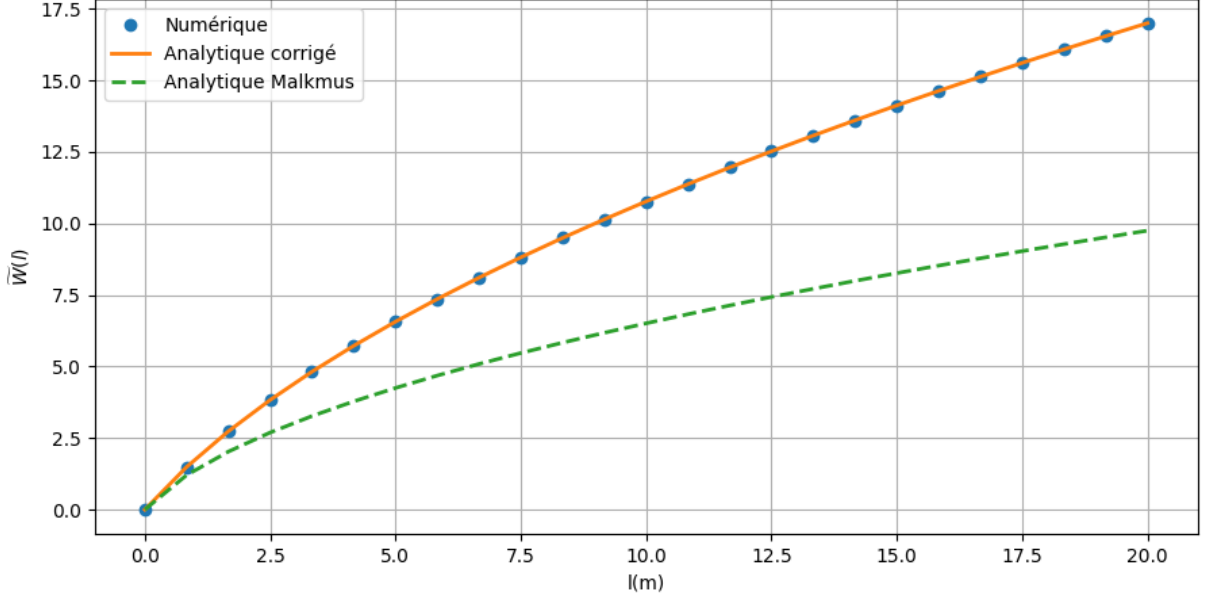


Figure 8: Estimations de $\widetilde{W}(l)$ par la formule de Malkmus originelle, le nouveau calcul et une intégration purement numérique.

analytiquement quand on intègre sur une bande de fréquence infinie, dans la pratique cependant, il y aura nécessairement des effets de bords. On peut également calculer l'intégrale du coefficient d'absorption k contre la mesure intensité (attention là-encore il ne s'agit pas d'une valeur moyenne de k si l'on n'introduit pas de constante de normalisation):

$$\tilde{k} = \frac{S^*}{\delta}$$

et introduire le paramètre $\phi = 2\pi \frac{b^*}{\delta}$ qui mesure l'importance du recouvrement. Si ϕ est petit devant 1, le recouvrement est faible puisque la largeur de raie est alors négligeable devant la distance moyenne des raies. Inversement si ϕ est grand devant 1, le recouvrement est fort. On peut écrire alors la loi de Malkmus avec ces deux paramètres :

$$\mathbb{E}[\tau(l)] = \exp\left[-\phi\left(\sqrt{1 + \frac{2\tilde{k}l}{\phi}} - 1\right)\right] \quad (22)$$

2.3.6 Identification des paramètres

Pour identifier les paramètres S^* et b^* , on se place dans la limite $\phi \ll 1$ de faible recouvrement pour laquelle on connaît les limites faibles et fortes (Eqs. 9 et 10). Par développements limités de la loi de Malkmus on peut écrire ces limites faibles et fortes:

$$\frac{\widetilde{W}_{faible}}{\delta} = \frac{S^* l}{\delta} \quad (23)$$

et

$$\frac{\widetilde{W}_{fort}}{\delta} = 2 \frac{\sqrt{\pi S^* b^* l}}{\delta} \quad (24)$$

Par identification avec les équations 9 et 10 (divisée par $\Delta\nu$), on obtient

$$\frac{S^*}{\delta} = \frac{\sum_{i=1}^N S_i}{\Delta\nu} \quad (25)$$

et

$$\frac{\pi b^*}{\delta} = \frac{1}{\Delta\nu} \frac{\left(\sum_{i=1}^N \sqrt{b_i S_i}\right)^2}{\sum_{i=1}^N S_i} \quad (26)$$

L'avantage de ces écritures fractionnaires étant de masquer totalement la question de la constante de normalisation. On a là-aussi un facteur 4 de différence par rapport aux travaux précédents. L'ajustement des paramètres permet donc de compenser l'éventuelle erreur de calcul dans la loi de Malkmus.

3 Simulations Monte Carlo de la transmittivité moyenne du gaz

L'objectif de cette partie est de mettre en place des algorithmes de Monte Carlo permettant de calculer la transmittivité moyenne du gaz traversé avec différentes hypothèses d'absorption. Ces algorithmes pourront ensuite être mis en œuvre dans des modèles plus complet d'échanges thermiques couplés (couplage ville/atmosphère par exemple).

3.1 Raie Lorentzienne unique

Pour introduire le formalisme et illustrer le principe, on commence par se placer dans un modèle de gaz à une seule raie de Lorentz de paramètres fixés. On écrit la transmittivité moyenne de la couche de longueur l du gaz :

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \tau(\nu) d\nu = \int_{\Delta\nu} \frac{1}{\Delta\nu} d\nu e^{-k(\nu)l}$$

Puis en utilisant

$$e^{-k(\nu)l} = \int_l^{+\infty} k(\nu) e^{-k(\nu)s} ds = \int_0^{+\infty} [\mathbf{1}_{s>l} \{1\} + \mathbf{1}_{s\leq l} \{0\}] k(\nu) e^{-k(\nu)s} ds,$$

on obtient :

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \int_{\Delta\nu} \frac{1}{\Delta\nu} d\nu \int_0^{+\infty} [\mathbf{1}_{s>l} \{1\} + \mathbf{1}_{s\leq l} \{0\}] k(\nu) e^{-k(\nu)s} ds.$$

Le coefficient d'absorption n'étant pas constant, on introduit un majorant $\hat{k}$ de ce coefficient et un mécanisme de collision nulle via la transformation formelle :

$$\begin{aligned} \overline{\tau_{\Delta\nu}(l)} = \int_{\Delta\nu} \frac{1}{\Delta\nu} d\nu \int_0^{+\infty} \hat{k} e^{-\hat{k}s} & \left[\mathbf{1}_{s>l} \{1\} \right. \\ & \left. + \mathbf{1}_{s\leq l} \left\{ \frac{k(\nu)}{\hat{k}} \{0\} + \left(1 - \frac{k(\nu)}{\hat{k}}\right) \{\tau(l-s)\} \right\} \right] ds \end{aligned} \quad (27)$$

On peut alors implémenter l'algorithme de Monte Carlo suivant pour simuler la transmittivité moyenne avec $k(\nu) = SF(\nu - \nu_0) = \frac{S}{\pi} \frac{b}{(\nu - \nu_0)^2 + b^2}$.

Algorithme de calcul de la transmittivité par collision nulle

1. Initialiser la distance restante : $l \leftarrow l_0$.
2. Tirer une fréquence ν_p uniformément dans la bande spectrale.
3. Calculer

$$p = \frac{S^* F(\nu - \nu_p)}{\hat{k}}.$$

4. Tant que $l > 0$:
 - (a) Tirer un libre parcours
 - (b) Si $s > l$, retourner $\{1\}$.
 - (c) Tirer $r \sim \mathcal{U}([0, 1])$.
 - (d) Si $r \leq p$, retourner $\{0\}$.
 - (e) Sinon (collision nulle), mettre

$$s \sim \text{Exp}(\hat{k}).$$

$$l \leftarrow l - s$$

et poursuivre la trajectoire.

5. Retourner $\{1\}$.

Le résultat de cet algorithme est comparé à la courbe théorique (Eqs. 5 et 6) ainsi qu'aux limites faibles et fortes déterminées précédemment pour plusieurs valeur de l sur la figure 9. La forme analytique utilisée est valable dans la limite d'une bande de fréquence très large (infinie en toute rigueur) par rapport à la largeur à mi-hauteur de la lorentzienne et centrée sur la fréquence de la raie, ce qui a été reproduit avec des paramètres adaptés dans le script Monte Carlo.

3.2 Distribution statistique de raies

Si l'on se place dans le cadre d'un modèle statistique de raies. Le formalisme doit être complété pour tenir compte de la distribution aléatoire en intensité et en fréquence des différentes raies. L'observable qui nous intéresse ici est l'espérance de la transmittivité $\tau(l)$ prise sur les distributions de raies. On a vu que cette espérance ne dépendait pas de la fréquence d'observation, il n'est donc plus utile de moyenner sur les fréquences d'observation. On écrit donc comme précédemment mais sans l'intégration fréquentielle :

$$\mathbb{E}[\tau(l)] = \mathbb{E}[\exp(-kl)] = \mathbb{E}\left(\int_l^{+\infty} k e^{-ks} ds\right)$$

Pour pouvoir simuler cette espérance par Monte Carlo, il est indispensable de travailler avec une mesure intensité μ finie donc normalisable. Dans cette hypothèse, il n'est plus nécessaire de se placer dans l'espace des mesures aléatoires de comptage, on peut directement exprimer l'espérance avec les densités de probabilités correspondantes en S et ν de la distribution de raie. Cette écriture est alors équivalente à l'intégration par rapport à la loi P_M du processus ponctuel. Commençons par écrire l'espérance recherchée avec des densités de probabilité $p_S(S)$ et $p_\nu(\nu)$ quelconques et un nombre N de raies (fixé):

$$\mathbb{E}[\tau(l)] = \int_{\Delta \nu^N} \int_{\mathbb{R}_+^N} \int_l^{+\infty} k e^{-ks} ds \prod_{i=1}^N p_\nu(\nu_i) p_S(S_i) d\nu_i dS_i,$$

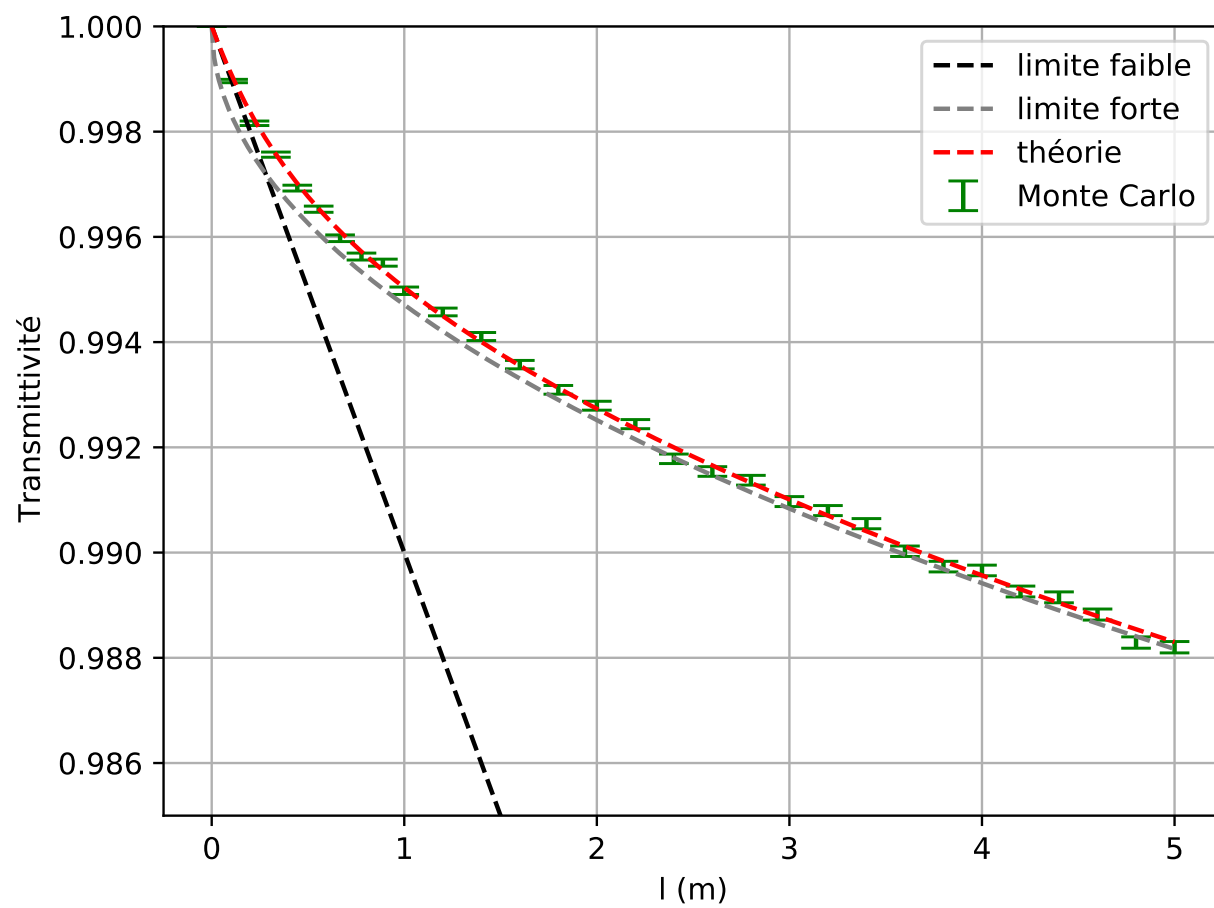


Figure 9: Simulations Monte Carlo de la transmittivité moyenne d'une colonne de gaz de longueur l et comparaison avec la courbe théorique et les limites faibles et fortes pour une raie de Lorentz seule.

où $k = \sum_i S_i F(\nu - \nu_i)$ qu'on notera $k = \sum_i k_i$. On peut, comme dans le paragraphe précédent, faire apparaître un processus de collision nulle en choisissant un majorant $\hat{k}$ du coefficient d'absorption :

$$\mathbb{E}[\tau(l)] = \int_{\Delta \nu^N} \int_{\mathbb{R}_+^N} \int_l^{+\infty} \hat{k} e^{-\hat{k}s} \left[\mathbf{1}_{s>l} \{1\} + \mathbf{1}_{s \leq l} \left\{ \frac{k}{\hat{k}} \{0\} + \left(1 - \frac{k}{\hat{k}}\right) \{\tau(l-s)\} \right\} \right] ds \prod_{i=1}^N p_\nu(\nu_i) p_S(S_i) d\nu_i dS_i \quad (28)$$

A ce stade, on peut directement construire un algorithme de Monte Carlo en collision nulle dont une trajectoire est décrite ci-dessous :

Algorithme de calcul de la transmittivité par collision nulle

1. Initialiser la distance restante : $l \leftarrow l_0$.
2. Échantillonner une configuration de raies
3. Tant que $l > 0$:
 - (a) Tirer un libre parcours :

$$s \sim \text{Exp}(\hat{k}).$$
 - (b) Si $s > l$, retourner $\{1\}$ (transmission).
 - (c) Calculer le coefficient d'absorption à partir de la configuration de raies
 - (d) Définir la probabilité de collision réelle :

$$p = \frac{k}{\hat{k}},$$
 - (e) Tirer $r \sim \mathcal{U}([0, 1])$.
 - (f) Si $r \leq p$, retourner $\{0\}$ (absorption).
 - (g) Sinon (collision nulle), mettre :

$$l \leftarrow l - s$$

et poursuivre la trajectoire.
4. Retourner $\{1\}$.

On pourrait aller un cran plus loin dans la probabilisation en écrivant:

$$\frac{k}{\hat{k}} \{0\} + \left(1 - \frac{k}{\hat{k}}\right) \{\tau(l-s)\} = \frac{\sum_i k_i}{N} \frac{N}{\hat{k}} \{0\} + \left(\frac{\sum_i \left(\frac{\hat{k}}{N} - k_i\right)}{\hat{k}} \right) \{\tau(l-s)\}$$

En théorie, il est possible alors de ne tirer qu'une seule raie entre deux collisions et de choisir l'absorption avec une probabilité $p_{abs} = \frac{N k_i}{\hat{k}}$. Plusieurs inconvénients rendent cette méthode peu efficace à mon sens. D'une part le majorant $\hat{k}$ doit être systématiquement supérieur à $N k_i$ pour chaque tirage de raie ce qui est très contraignant et coûteux en temps de calcul. D'autre part entre chaque collision on doit échantillonner une raie dans une même configuration de raies fixée au départ du chemin. On ne s'affranchit donc pas de l'échantillonnage d'une configuration complète de raies à chaque chemin. Dans la pratique, l'approche en configuration spectrale complète se révèle donc plus efficace qu'une approche en découpant raie par raie.

Cette méthode a été mise en œuvre pour une distribution exponentielle classique $p(S) = \frac{1}{S^*} e^{-\frac{S}{S^*}}$ (figure 10) et pour une densité de Malkmus $\rho(S) = \frac{1}{S} e^{-\frac{S}{S^*}}$ avec troncature en intensité et renormalisation en densité

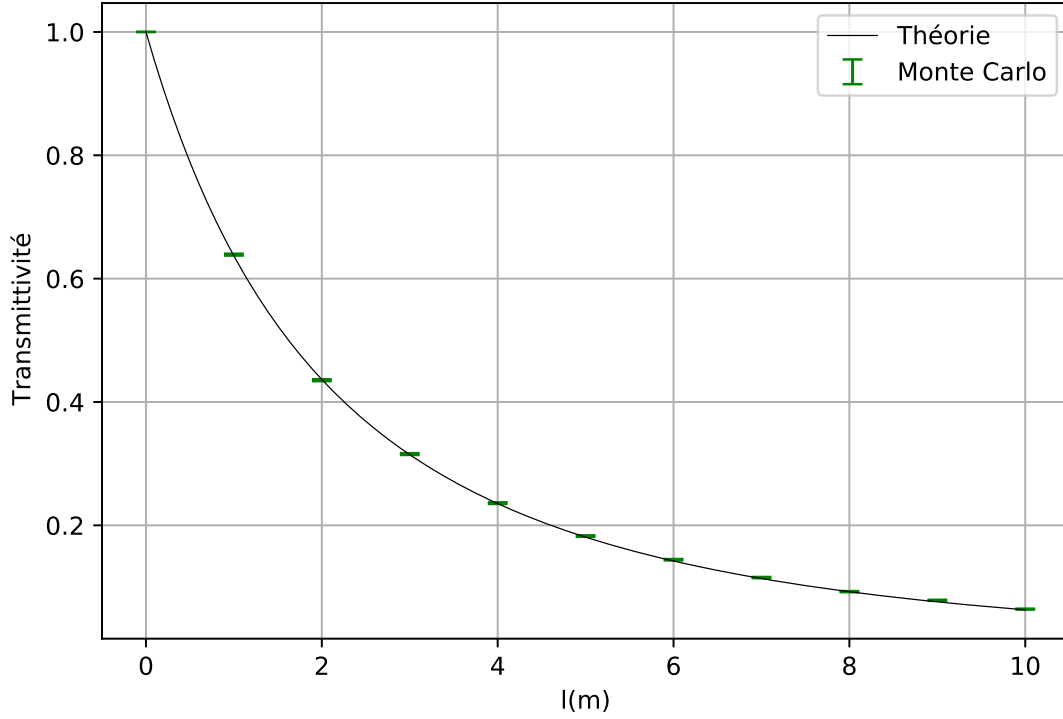


Figure 10: Simulations Monte Carlo de la transmittivité moyenne d'une colonne de gaz de longueur l en m et comparaison avec la courbe théorique pour une distribution en intensité exponentielle.

de probabilité (figure 11). Le tirage de la loi s'effectue ensuite avec la méthode de rejet déjà décrite. Les simulations de Monte Carlo sont comparées dans ces deux figures aux courbes théoriques correspondantes. La transmittivité dans le cas exponentielle s'obtient analytiquement par un raisonnement analogue à celui ayant permis d'obtenir la loi de Malkmus, le calcul intégral donne :

$$\mathbb{E}[\tau(l)] = \exp\left[-\tilde{k}l\left(\sqrt{1 + \frac{\tilde{k}l}{2\phi}}\right)^{-\frac{1}{2}}\right] \quad (29)$$

On observe une convergence remarquable de l'algorithme de Monte Carlo vers les formules analytiques ce qui permet d'envisager l'intégration de cette approche dans des simulations de Monte Carlo plus complexes avec couplage conducto-convecto-radiatif. Pour le modèle de Malkmus en particulier, on a simulé plusieurs choix de troncature, et on observe une convergence acceptable à partir de $S_{min} = 10^{-2} S^*$. On peut insister à nouveau sur l'importance du facteur de normalisation dans la mise en œuvre de cet algorithme, en particulier pour le choix du nombre de raies et du paramètre δ . Le choix qui a été fait ici est de ne pas toucher à la formule de Malkmus (sauf pour corriger le facteur 4), d'imposer un paramètre δ et une largeur de bande $\Delta\nu$ puis de choisir $N = \frac{\Delta\nu}{\delta} C$ où C est un paramètre de normalisation dépendant de S_{min} . Pour information $C = \exp(1(\frac{S_{min}}{S^*}))$ où $\exp(1)$ est l'intégrale exponentielle d'ordre 1.

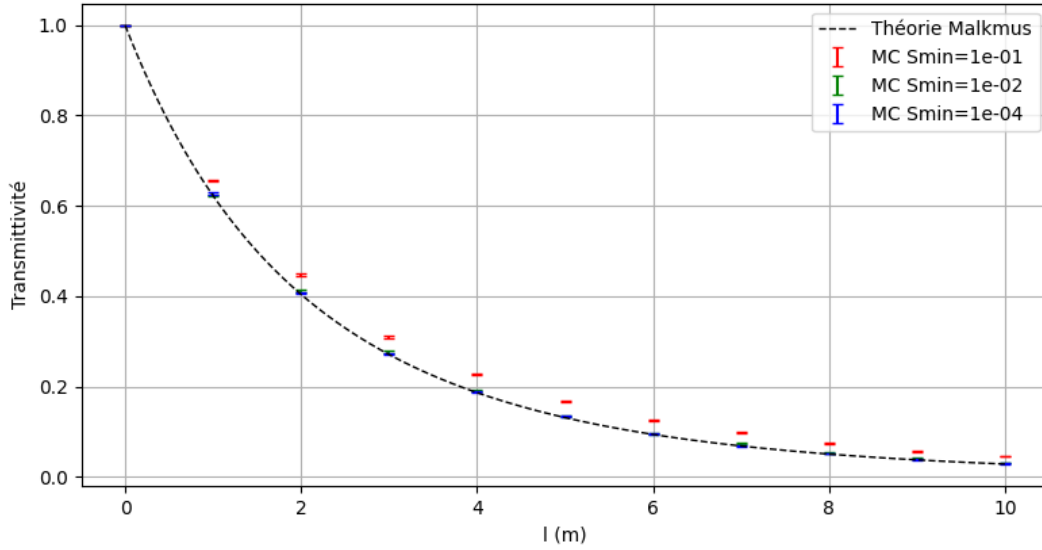


Figure 11: Simulations Monte Carlo de la transmittivité moyenne d'une colonne de gaz de longueur l et comparaison avec la courbe théorique pour une distribution en intensité de Malkmus. Plusieurs choix de troncature ont été testés pour illustrer la convergence vers la formule analytique. La formule analytique utilisée est celle correspondant au nouveau calcul.

4 Conclusion

Dans ce document, qui fait suite à une après-midi de travail au tableau avec Lamine, Najda et Frédéric, on a revisité les bases des modèles statistiques de raies de type Malkmus en s'inspirant notamment de la démarche présentée dans le document scanné de Richard et la thèse de Nicolas Meilhac. En introduisant la notion de mesure aléatoire de comptage, on a pu dériver les résultats principaux du modèle dans un cadre mathématique très naturel qui évite un certain nombres de difficultés. Ce document nécessite en revanche une relecture détaillée car il amende quelques calculs et interprétations physiques communément admis dans la plupart sinon toutes les publications actuelles. L'implémentation fructueuse d'un algorithme de Monte Carlo pour retrouver la loi de transmittivité de Malkmus corrigée semble justifier la pertinence de ces modifications mais il faudra là-aussi confirmation. L'objectif de cette séance de travail et de ce document était d'examiner la possibilité d'intégrer le modèle statistique de raies de Malkmus dans un contexte de thermique couplé complexe résolu en espace de chemin par Monte Carlo. Moyennant une attention particulière aux constantes de normalisation, la démarche présentée ici permet d'envisager cette intégration sans difficulté particulière.