Approximation de Schiff appliquée au calcul des propriétés radiatives de micro-organismes photosynthétiques et résolution par la méthode de Monte Carlo

Julien CHARON[1,2,3], Stéphane BLANCO[4], Cyril CALIOT[3], Jean-François CORNET[2], Jérémi DAUCHET[2], Mouna EL HAFI[1], Richard FOURNIER[4], Sebastian WEITZ [2,4]

[1] *RAPSODEE, UMR CNRS 5302 - Mines Albi - Albi*

[2] *Institut Pascal, UMR CNRS 6602 - Clermont-Ferrand*

[3] *PROMES, UPR CNRS 8521 - Odeillo*

[4] *LAPLACE, UMR CNRS 5213 - Toulouse*

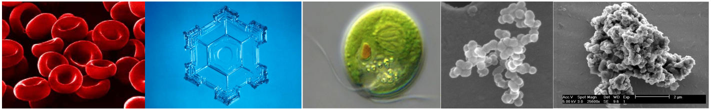
Institut Fresnel, UMR CNRS 7249 - Marseille

9ème Journées d'Etudes en Rayonnement Thermique, ISAE-ENSMA, Poitiers

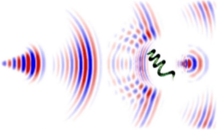
26 - 27 Novembre 2015

Obtention des propriétés radiatives : une difficulté

- Obtention des propriétés radiatives de particules non sphériques et de paramètre de taille intermédiaire est une difficulté récurrente
- Divers domaines sont concernés : océanographie, astrophysique, biomédical, atmosphérique, ingénierie de la photosynthèse ....



- Nécessité de résoudre les équations de Maxwell et plus particulièrement le problème de diffusion d'une onde par une particule



Vers une résolution des équations de Maxwell

Méthodes de résolution rigoureuse

Résolution numérique rigoureuse des équations de Maxwell

Lorenz-Mie	T-Matrix	DDA	MOM	FEM
Particules sphériques	Limitée par précision en virgule flottante	Limitées par la ressource informatique (taille mémoire, nombres processeurs)		

- En pratique, implémentation numérique limitées pour traiter des particules de grande taille et de géométrie complexe parfois très allongée
- Forte activité de recherche pour améliorer ces méthodes rigoureuses
- Nécessité d'utiliser des modèles approchés de l'interaction onde-particule

Vers une résolution des équations de Maxwell

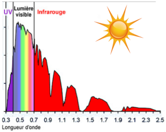
Approximations du modèle électromagnétique d'interaction onde-particule

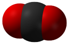
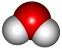
Approximations

- **Rayleigh**
  $x \ll 1$
  $x \mid m_r - 1 \mid \ll 1$
- **Rayleigh-Gans-Debye**
  $|m_r - 1| \ll 1$
  $x \mid m_r - 1 \mid \ll 1$
- **Diffraction Anomale**
  $x \gg 1$
  $\mid m_r - 1 \mid \ll 1$
- **Schiff**
  $x \gg 1$
  $\mid m_r - 1 \mid \ll 1$
  \+ Description des puissances diffusées aux grands angles
- **Optique Géométrique**
  $x \gg 1$
  $x \mid m_r - 1 \mid \gg 1$

- Approximation DA et/ou Schiff présente un intérêt pour toutes les communautés traitant de "particules ténues" (*soft particles*) (astrophysique, atmosphérique,...) et en particulier celle des photobioréacteurs

Ingénierie de la photosynthèse : une alternative possible aux ressources fossiles

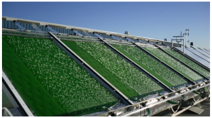


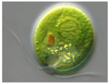



CO_2 H_2O

Minéraux

Photobioréacteur





O_2

Biomasse

Bioraffinerie

vecteurs énergétiques

matière première pour la chimie

molécules à hautes valeurs ajoutées

Necessité de développer des procédés innovants et efficaces atteignant au minimum un rendement thermodynamique de 10%

Contexte scientifique : Optimisation du procédé

- Procédés limités par le transfert de rayonnement
- Optimisation du procédé implique de connaître avec précision le champs de rayonnement
- Nécessité de résoudre l'Equation de Transfert Radiatif au sein du volume de culture

$$\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} L_\nu(\vec{r}, \vec{\omega}) = -C\sigma_{ext} L_\nu(\vec{r}, \vec{\omega}) + C\sigma_{sca} \int_{4\pi} d\vec{\omega}' L_\nu(\vec{r}, \vec{\omega}) p_{\Omega,\nu}(\omega \mid \omega')$$

σ_{sca} : Section efficace de diffusion

σ_{ext} : Section efficace d'extinction

$p_{\Omega,\nu}$: Fonction de phase

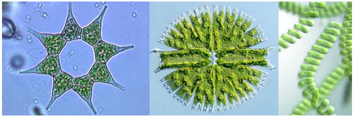
L_ν : Luminance

C : Concentration de la suspension de micro-organismes

- Propriétés radiatives des micro-organismes indispensables à la résolution de l'ETR
- Approximation de Schiff adaptée à l'obtention de ces propriétés radiatives

Vers une résolution de l'approximation de Schiff

- Approximation de Schiff adaptée pour l'étude des micro-organismes
- Modèle électromagnétique simplifié mais résolution numérique non évidente :
  - → Fonction de phase aux grands angles pour des particules de formes simples
  - → Particules avec des géométries complexes

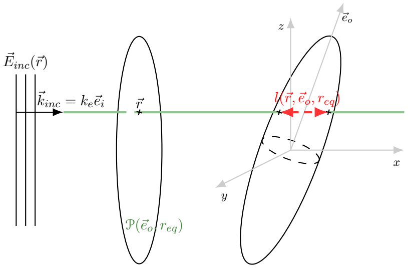


- Dans un premier temps, développer une méthodologie de résolution pour des particules à géométries simples (cylindre, sphéroïde)
- Résolution de l'approximation de Schiff par la méthode de Monte Carlo puisque
  - → Schiff conduit à une formulation intégrale des propriétés radiatives
  - → Capacité de la méthode à gérer les géométries complexes

Plan

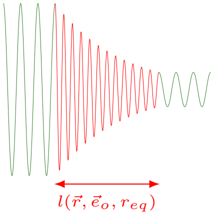
Approximation de Schiff

Aspect physique et conditions de validité



$l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})$: Longueur de traversée au sein de la particule

$\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$: Surface projetée de la particule sur un plan perpendiculaire à la direction incidente



$x = \frac{2\pi \bar{r}_{eq}}{\lambda_e} \gg 1$: les images de l'optique géométrique sont applicables

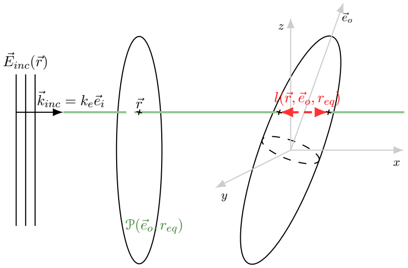
$|m_r - 1| \ll 1$: les réflexions et réfractions de la lumière incidente peuvent être négligées

Schiff L., 1956 *Physical Review* **104** 1481-1485

Van de Hulst H.C., 1957 *Light Scattering by Small Particles*

Approximation de Schiff

Formulation des sections efficaces



$l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})$: Longueur de traversée au sein de la particule

$\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$: Surface projetée de la particule sur un plan perpendiculaire à la direction incidente

$$\hat{\sigma}_{ext} = 2\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} 1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos\left(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})\right) d\vec{r}$$

$$\hat{\sigma}_{abs} = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} 1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}$$

$$\hat{\sigma}_{sca} = \hat{\sigma}_{ext} - \hat{\sigma}_{abs}$$

Schiff L., 1956 *Physical Review* **104** 1481-1485   Van de Hulst H.C., 1957 *Light Scattering by Small Particles*

Plan

Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation des sections efficaces

Les solutions de l'approximation de Schiff sont des intégrales.

La méthode de **Monte Carlo** est choisie pour les résoudre en tenant compte de la double intégrations orientation/taille

Pour obtenir une expression statistique compatible avec Monte Carlo, on introduit une fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}}$:

$$\hat{\sigma}_{ext} = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} p_{\vec{R}} \underbrace{\frac{2\left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos\left(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})\right)\right]}{p_{\vec{R}}}}_{w_{ext}(\vec{r})} d\vec{r}$$

En tenant compte de la double intégrations orientation/taille :

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

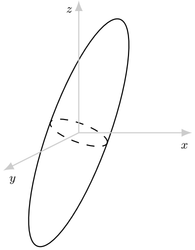
Delatorre J. and *al*, 2014 *Solar Energy* **103** 653 - 681

Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

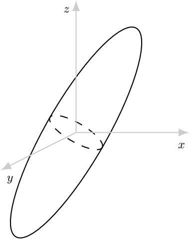


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

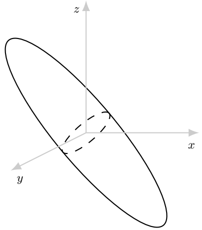


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

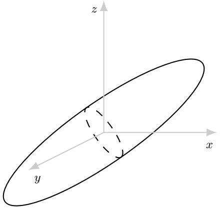


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

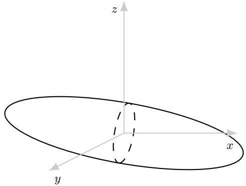


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

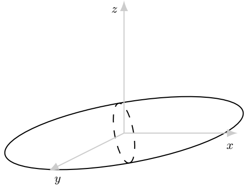


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

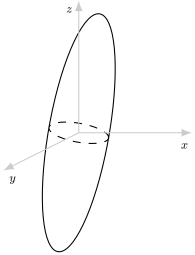


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

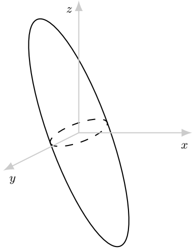


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

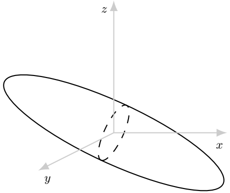


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$

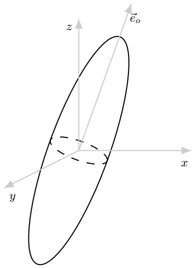


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une orientation $\vec{e}_o$ selon la fonction densité de probabilité isotrope $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) = \frac{1}{4\pi}$



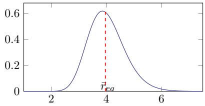
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

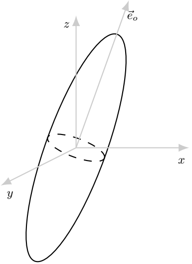
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





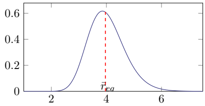
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

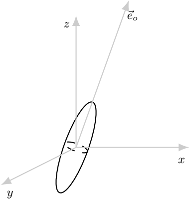
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





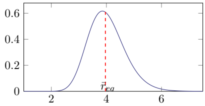
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

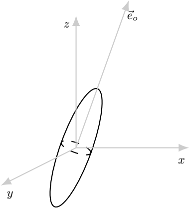
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





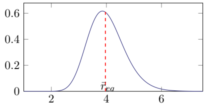
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

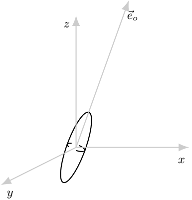
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





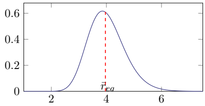
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

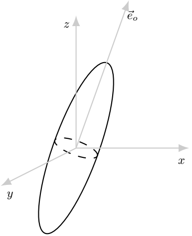
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2\ln^2 s}\right]$$





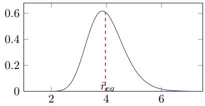
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

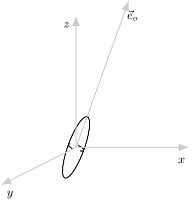
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





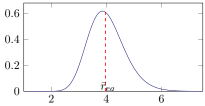
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

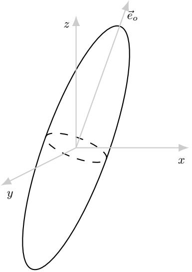
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





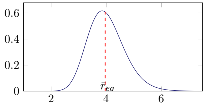
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

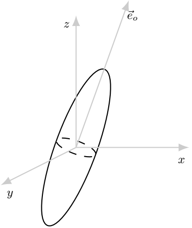
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$





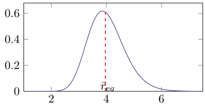
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

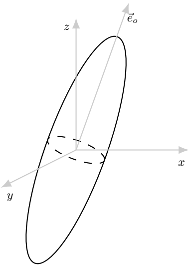
Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une taille r_{eq} selon la loi de probabilité log-normale

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right]$$



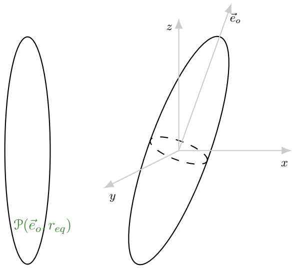


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

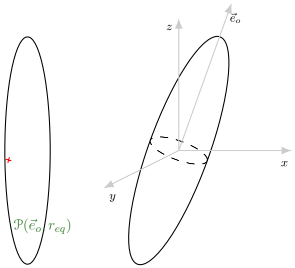


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

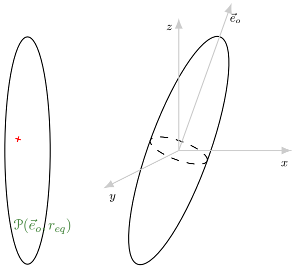


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$



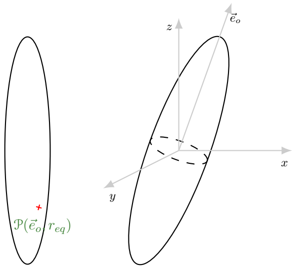
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme

$p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

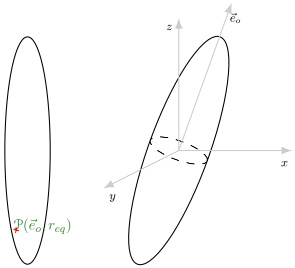


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

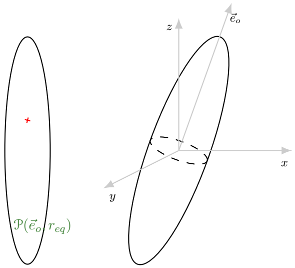


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

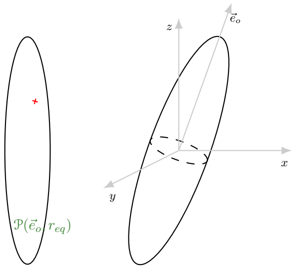


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

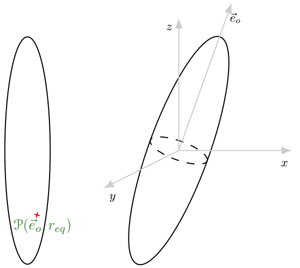


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

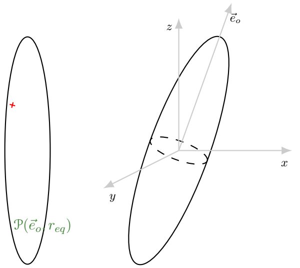


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

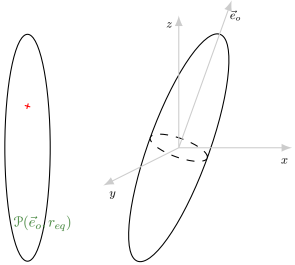


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

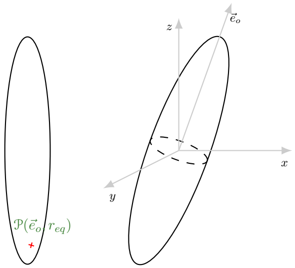


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

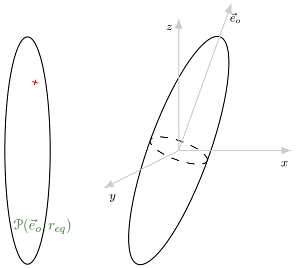


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

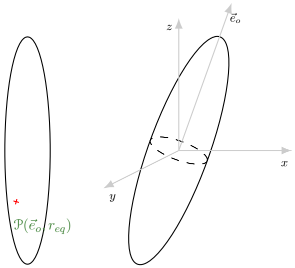


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

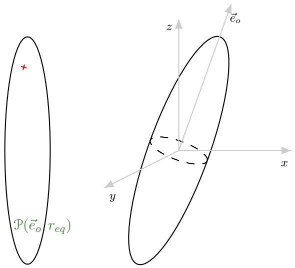


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

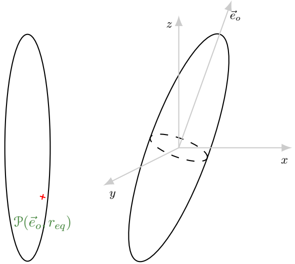


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme
$p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$

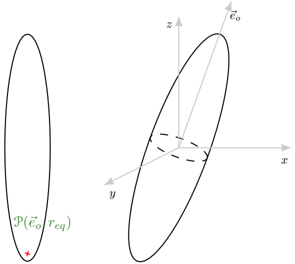


Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$



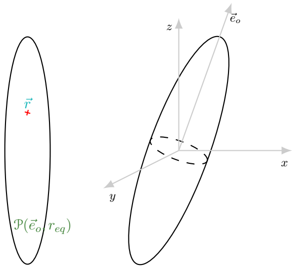
Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$

Tirage aléatoire d'une position $\vec{r}$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon la fonction de densité de probabilité uniforme

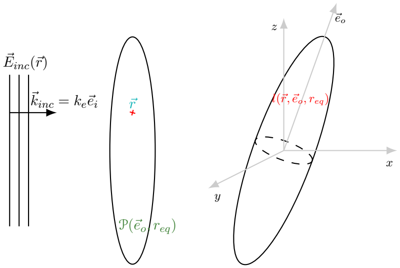
$p_{\vec{R}} = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

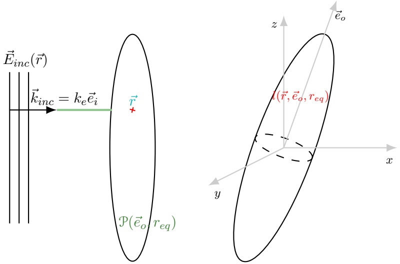
$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

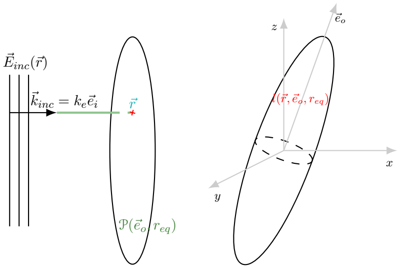
$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

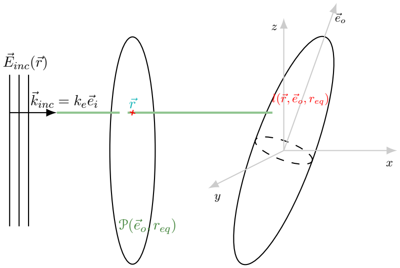
$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

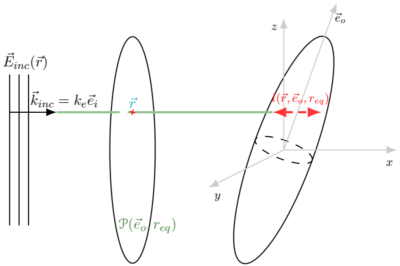
$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

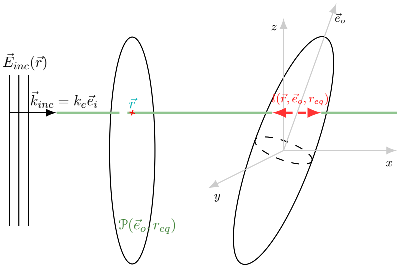
$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

$$\sigma_{ext} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w_{ext}(\vec{r})$$



Résolution de l'approximation de Schiff par Monte Carlo

Formulation intégrales des sections efficaces

Généralisation :

$$\sigma = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{e}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w(\vec{r})$$

$$w_{ext} = 2P(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos\left(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})\right)\right]$$

$$w_{abs} = P(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})}\right]$$

$$w_{sca} = w_{ext} - w_{abs}$$

Algorithme :

Tirage de $\vec{e}_o$

Tirage de r_{eq}

Tirage de $\vec{r}$

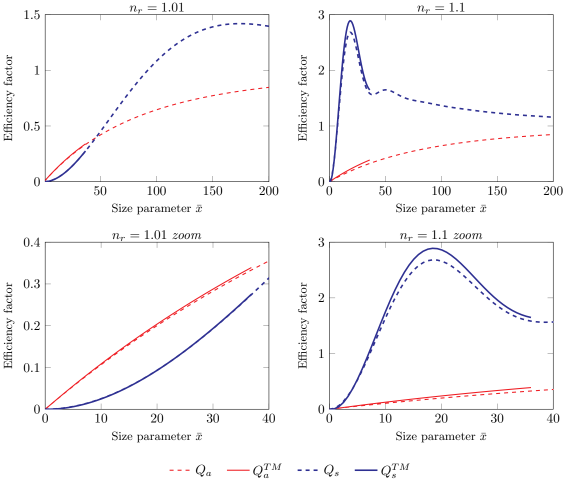
Calcul de w_i

N nombre de réalisation de l'algorithme

Estimation des sections efficaces σ :

$$\sigma \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i \pm \sqrt{\frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^{N} w_i^2 - \bar{\sigma}^2\right]}$$

Sections efficaces - particule sphéroïdale



Absorption

Scattering

- - - - - Schiff

——— T-Matrix

Paramètres :

$\lambda_e = 0.45\mu m$

$\kappa_r = 4.10^{-3}$

$s = 1.18$

$R = 0.837$

$r_{eq} = [1, 15]\mu m$

$N = 10^6$ réalisations

Erreur Num. $\leq 0.2\%$

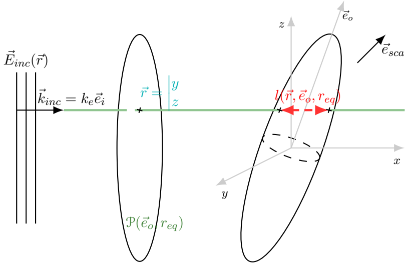
T-Matrix code : http ://www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko/

Charon J. and al. JQSRT, *Nov. 2015*

Fonction de phase

Fonction de phase :

$$p(\vec{e}_{sca} \mid \vec{e}_{inc}) = \frac{W_{sca}}{\sigma_{sca}}$$



Petit angles de diffusion $\theta_{sca} < \theta_l$:

$$\hat{W}_{sca} = \left| \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} \underbrace{\frac{k_e}{2\pi} e^{ik_e \theta_{sca}(y \cos\phi_{sca} + z \sin\phi_{sca})} \left[1 - e^{-ik_e(m_r - 1) l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})} \right]}_{f(\vec{r})} d\vec{r} \right|^2$$

Grand angles de diffusion $\theta_{sca} > \theta_l$:

$$\hat{W}_{sca} = \frac{r}{\sin^n(\theta_{sca}/2)} \frac{1 + \cos^2(\theta_{sca})}{2}$$

Dauchet J. and *al*,2015, *JQSRT*, **161**, 60-84

Fonction de phase

$$\hat{W}_{sca} = \left| \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} f(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2 = \mathcal{R}e^2 \int_{\mathcal{P}} f(\vec{r}) d\vec{r} + \mathcal{I}m^2 \int_{\mathcal{P}} f(\vec{r}) d\vec{r}$$

En utilisant le fait que

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}e^2 \int_{\mathcal{P}} f(\vec{r}) d\vec{r} &= \mathcal{R}e \left(\int_{\mathcal{P}} f(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right) \mathcal{R}e \left(\int_{\mathcal{P}} f(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \right) \\
&= \int_{\mathcal{P}} \mathcal{R}e \left(f(\vec{r}_1) \right) d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{P}} \mathcal{R}e \left(f(\vec{r}_2) \right) d\vec{r}_2 \\
&= \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 \mathcal{R}e \left(f(\vec{r}_1) \right) \mathcal{R}e \left(f(\vec{r}_2) \right)
\end{aligned}$$

et en procédant de même pour la partie imaginaire, on obtient

$$\hat{W}_{sca} = \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 \left[\mathcal{R}e f(\vec{r}_1) \mathcal{R}e f(\vec{r}_2) + \mathcal{I}m f(\vec{r}_1) \mathcal{I}m f(\vec{r}_2) \right]$$

Section efficace différentielle de diffusion

$$\hat{W}_{sca} = \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 \left[\Re ef(\vec{r}_1)\Re ef(\vec{r}_2) + \Im mf(\vec{r}_1)\Im mf(\vec{r}_2)\right]$$

En introduisant la densité de probabilité uniforme $p_{R_1} = p_{R_2} = \frac{1}{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})}$:

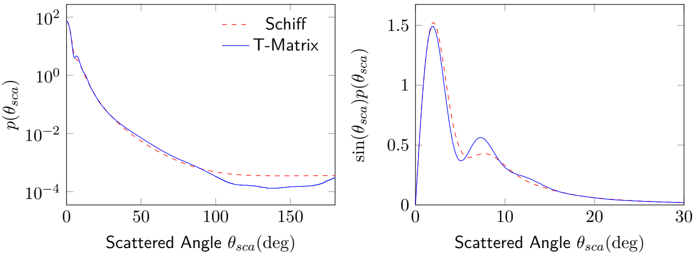
$$\hat{W}_{sca} = \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 p_{R_1} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 p_{R_2} \underbrace{\frac{\Re ef(\vec{r}_1)\Re ef(\vec{r}_2) + \Im mf(\vec{r}_1)\Im mf(\vec{r}_2)}{p_{R_1} p_{R_2}}}_{w(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}$$

et en tenant compte de la double intégrations orientation/taille :

$$W_{sca} = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{R_1} \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{R_2} w(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Section efficace différentielle - particule cylindrique

Comparaison Schiff's approximation - T-Matrix



Paramètres :

$\lambda_e = 0.750\mu m$

$n_r = 1.08$

$\kappa_r = 4.10^{-3}$

$s = 1.18$

$R = 0.837$

$r_{eq} = 3.963\mu m$

$\theta_l = 15.4$

$N = 10^6$ réalisations

Num. error $\leq 5\%$

T-Matrix code : http ://www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko/

Plan

Sensibilités

$$\sigma = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w$$

$$\partial_\pi \sigma = \partial_\pi \cdot \left[\int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} w(\pi) \right]$$

$$\partial_\pi \sigma = \int_{4\pi} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r} p_{\vec{R}} \partial_\pi w(\pi)$$

Notre algorithme de Monte Carlo estime simultanément les trois sections efficaces et leurs dérivées par rapport au paramètre $\pi = \{\lambda_e, n_r, \kappa_r\}$:

- avec la même formulation intégrale $\equiv$ même algorithme$\equiv$ même procédure d'échantillonnage
- sans augmentation significative du temps de calcul numérique

Delatorre J., 2014 *Solar Energy* **103** 653 - 681

Conclusion et Perspectives

Conclusion

- Approximation de Schiff validée avec T-Matrice
- Le même algorithme de Monte Carlo estime $\sigma_{abs}, \sigma_{sca}, \sigma_{ext}$, leurs sensibilités à λ_e, κ_r, n_r et les incertitudes associées avec les temps de calcul suivant :
  Cylindre : $13s$ Sphéroïde : $8s$ Incertitude $\leq 0.2\%$
- Application de l'approximation de Schiff à des géométries complexes (projet IDEX Algue) en collaboration avec une entreprise d'ingénierie informatique Meso-Star

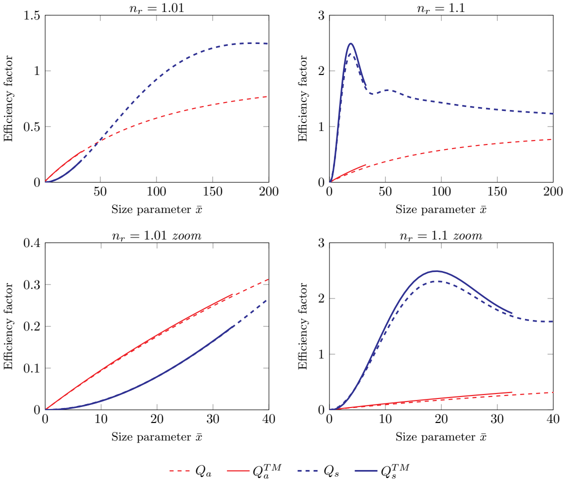
Perspectives

- Résolution des équations de Maxwell en utilisant le formalisme vectoriel

EDStar : http ://edstar.lmd.jussieu.fr/

Merci pour votre attention

Sections efficaces - particule cylindrique



Absorption

Diffusion

- - - - - Schiff

——— T-Matrix

Paramètres :

$\lambda_e = 0.45\mu m$

$\kappa_r = 4.10^{-3}$

$s = 1.18$

$R = 0.837$

$r_{eq} = [1, 15]\mu m$

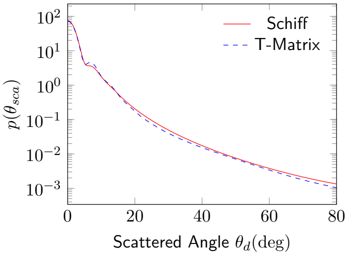
$N = 10^6$ réalisations

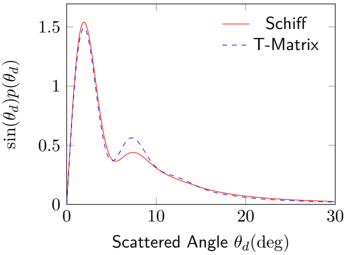
Erreur Num. $\leq 0.2\%$

Charon J. and al, JQSRT, *Nov. 2015*

Section efficace différentielle - particule sphéroïdale

Comparaison Schiff's approximation - T-Matrix





Paramètres :

$\lambda_e = 0.7\mu m$

$n_r = 1.08$

$\kappa_r = 4.10^{-3}$

$s = 1.18$

$R = 0.837$

$r_{eq} = 3.963\mu m$

$\theta_l = 14$

$r = 5.85.10^{-14}$

$n = 3.39$

Analyse de sensibilité - validation