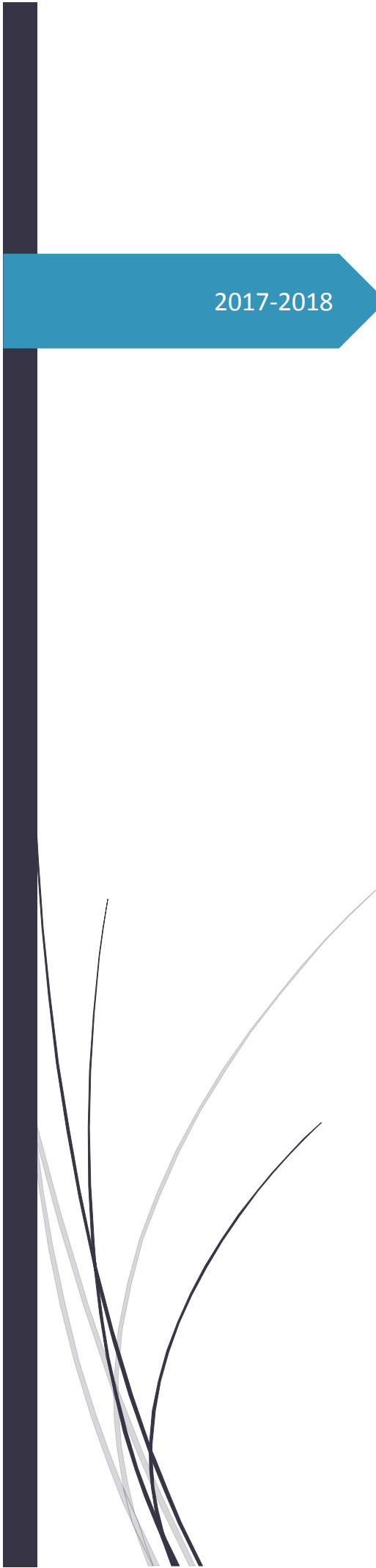


A thick dark blue vertical bar runs down the left side of the page. A blue arrow-shaped banner points to the right from this bar, containing the text '2017-2018'. In the bottom left corner, there are several thin, curved, light grey lines that sweep upwards and to the right.

2017-2018

Projet de recherche

Simulation de la diffusion de la lumière
avec la méthode de Monte-Carlo

Pierre MOLLO
MA0802

Table des matières

I	Modélisation du problème	4
1	Étude du milieu	4
1.1	Paramètre des milieux étudiés	4
1.2	Maillage du milieu et du bord	6
2	Modélisation d'un photon	8
2.1	Paramètres et initialisation des photons	8
2.2	Hop - Saut	9
2.3	Drop - Dépôt d'énergie	10
2.4	Spin - Angle	11
2.5	Roulette	13
3	Interaction des photons	14
3.1	Sortie du milieu	15
3.2	Réflexion sur une interface	16
3.2.1	Réflexion sur bord latéral	16
3.2.2	Réflexion sur bord sup/inf	18
3.3	Interactions multiples	19
4	Diagramme et schéma récapitulatif	20
II	Utilisation du code	22
5	Effet des paramètres	22
5.1	Influence du nombre de photons	22
5.2	Influence de l'absorption, la diffusion et l'anisotropie	25
6	Étude de la convergence	28
7	Visualisation des différents milieux	30
8	Comparaison avec une solution analytique	34
8.1	Calcul de la solution analytique	34
8.2	Comparaison avec la solution par Monte-Carlo	35
9	Prolongement en multi-couches	39
9.1	Comportement avec un obstacle	39
9.2	Simulation avec plusieurs couches	41
III	Conclusion	43

Introduction

Nous allons présenter durant ce projet, la méthode de Monte-Carlo appliquée à la propagation de la lumière dans des tissus biologiques. Étudier cette propagation présente plusieurs applications, nous pouvons citer par exemple la possibilité d'obtenir des mesures métaboliques sur des couches peu profondes de la tête. L'un des avantages de la lumière est qu'elle est non-ionisante, c'est-à-dire qu'elle n'a pas d'effets biologiques, contrairement aux rayons X et γ utilisés dans d'autres méthodes d'imagerie médicale. De plus, la prise de mesure dans le cas de la spectroscopie proche infrarouge (Near-Infrared Spectroscopy, NIRS) est beaucoup moins contraignante que pour une IRM, ainsi elle est plus facilement applicable aux nourrissons.

Nous souhaitons donc modéliser la propagation de la lumière à l'aide de la méthode de Monte-Carlo. Le principe de fonctionnement de cette méthode est simple, il consiste à reproduire le comportement des photons en utilisant plusieurs méthodes probabilistes. Ainsi, une fois que nous arrivons à mimer le comportement de ces photons, nous sommes libre de les simuler dans des cas complexes. Notamment dans des cas où la solution analytique est très difficile, voire impossible à trouver.

Le principal atout de cette méthode est donc sa simplicité de mise en œuvre. Comme nous le verrons par la suite, seules quelques étapes sont suffisantes pour décrire efficacement le comportement d'un photon. Cependant, pour obtenir des estimations fiables, il nous faudra parfois simuler de très nombreux photons, nous serons alors confronté au problème majeur de la méthode : son temps de calcul.

Une fois que nous aurons réussi à mettre la méthode en place, nous chercherons à l'utiliser comme solution de l'équation de la diffusion stationnaire, avec comme inconnue la densité de photons. En effet, cette équation est une approximation de l'équation de transfert radiatif, qui elle, décrit la distribution spatiale de l'énergie émise par une source.

Dans une première partie, nous verrons les différentes étapes de la simulation des photons. Puis dans une seconde partie nous chercherons à exploiter le code mis en place pour le valider, puis pour en tirer des informations.

Première partie

Modélisation du problème

1 Étude du milieu

1.1 Paramètre des milieux étudiés

Dans le cadre de ce projet de simulation de la lumière, il paraît évident que le milieu dans lequel nous souhaitons modéliser celle-ci va jouer un rôle primordial. Ici, comme expliqué en introduction, nous souhaitons étudier la diffusion de la lumière dans des tissus biologiques. Or, il se trouve que ces tissus ont, en général, une forte teneur en eau, ce qui leur confère des propriétés optiques intéressantes. Ce phénomène est encore accentué chez le nourrisson pour lequel les tissus cartilagineux et osseux ne sont pas encore complètement formés. Ceci justifie donc notre volonté d'utiliser la lumière pour faire de l'imagerie médicale.

Il est important de noter que certaines propriétés optiques dépendent de la longueur d'onde des rayons lumineux considérés. Dans notre cas, nous cherchons à faire pénétrer la lumière le plus profond possible dans les tissus, nous utilisons alors des rayons de l'ordre de 800nm. En effet, le proche infrarouge correspond aux longueurs d'ondes les moins absorbées par les tissus humain. Ainsi les propriétés optiques utilisées lors de ce projet sont toutes décrites pour de la lumière à environ 800nm. De plus, pour que la simulation soit réalisable, nous supposons que les milieux considérés sont homogènes ou formés de couches homogènes. Maintenant que nous avons défini les bases de nos milieux, il nous faut décrire les propriétés optiques qui nous intéressent.

Lorsqu'un photon arrive dans un milieu, il y a trois type d'interaction possible :

- Transmission
- Absorption
- Diffusion

Pour une quantité d'énergie $E_{incidente}$, la fraction d'énergie diffusée $E_{diffusee}$ correspond aux photons dont la trajectoire est déviée par les éléments du milieu, la partie d'énergie absorbée $E_{absorbée}$ correspond à l'énergie transmise au nuage électronique des atomes du milieu et enfin l'énergie transmise $E_{transmise}$ correspond aux photons qui n'ont subi aucune interaction avec le milieu. Nous avons alors la relation suivante :

$$E_{incidente} - E_{transmise} = E_{absorbée} + E_{diffusee}$$

Nous définissons alors l'énergie $E_{attenuée} = E_{absorbée} + E_{diffusée}$. Nous utilisons la loi de Beer-Lambert pour quantifier l'énergie atténuée. Pour un milieu homogène de longueur x , soumis à un rayonnement monochromatique de N_0 photons, le nombre de photon transmis N_x suit la loi d'affaiblissement :

$$N_x = N_0 e^{-\mu_t x}$$

où μ_t est le coefficient d'atténuation du milieu [m^{-1}]. Comme nous l'avons vu précédemment, l'énergie atténuée est la somme de l'énergie diffusée et absorbée, donc nous avons $\mu_t = \mu_a + \mu_s$, où μ_a est le coefficient d'absorption et μ_s le coefficient de diffusion (scattering).

Comme nous l'avons abordé ci-dessus, l'absorption de l'énergie est causée par le nuage électronique. En effet, les électrons qui composent le nuage vont utiliser cette énergie pour se déplacer dans des couches supérieures de celui-ci, c'est le phénomène d'excitation. Si l'énergie est suffisante, certains électrons peuvent même s'échapper du nuage, c'est le phénomène d'ionisation, qui est très rare avec la lumière visible. Il paraît donc naturel que le coefficient μ_a qui modélise cette interaction dépende de la composition chimique du milieu.

En ce qui concerne la diffusion, ce sont les noyaux atomiques qui «dévient» les photons, sans en absorber l'énergie. Ce sont donc les paramètres physiques qui vont définir le coefficient μ_s , comme par exemple la taille des noyaux/molécules ou la structure du milieu.

De plus, nous aurons besoin des indices de réfraction des milieux que nous voulons étudier. En effet, ils seront nécessaires pour établir les rebonds des photons sur le bord des milieux. En réalité, les coefficients de réfraction pour les différents tissus biologiques sont très proches, nous supposons qu'ils sont égaux à $n_{\text{tissu}} \simeq 1.3$, mais différents de l'indice de l'air donné par $n_{\text{air}} = 1.00$. Les seuls rebonds que nous considérerons seront ceux sur le bord du domaine.

Dans notre cas, nous cherchons à représenter la diffusion de la lumière dans la tête, nous étudierons donc la méthode sur les tissus qui la composent. Dans l'ordre croissant de profondeur :

- le cuir chevelu
- le crâne
- le LCR¹
- Matière grise/Matière blanche

Une liste de leurs coefficients est dressée dans la partie (7).

1. Liquide Céphalo-Rachidien (Cerebro Spinal Fluid)

1.2 Maillage du milieu et du bord

Pour que nos données soient plus simples à interpréter, nous allons faire nos simulations sur un domaine carré de l'ordre de la taille d'une tête de nourrisson (centrée en l'origine). Il serait plus approprié de prendre un domaine en forme de disque, cependant l'utilisation d'un carré offre des avantages. Par exemple ce domaine sera beaucoup plus simple à mailler, à représenter et les fonctions de calcul des trajectoires pour les rebonds sur les bords sont plus simple pour des bords rectilignes. Pour une étude qualitative, l'approximation d'un cercle en carré ne pose pas réellement de problème. Nous choisissons alors le domaine :

$$\Omega = [-60; 60] \times [-60; 60]$$

Ainsi, une première approche des résultats sera de les valider par le « bon sens ».

Pour que nos simulations aboutissent à des images correctes, nous optons pour une grille de taille (1000×1000) appliquée sur notre domaine Ω . Nous modélisons cette grille par une matrice A de taille (1000×1000) initialisé à 0, chaque coefficient de la matrice A représentera la quantité d'énergie déposée par les photons dans une maille (bin) de la grille.

En plus de la matrice A , nous utilisons une matrice $Bord$ de taille (1000×4) qui stockera l'énergie des photons s'échappant du milieu. Chacune des colonnes de $Bord$ représente un bord du domaine (gauche-haut-droit-bas).

Lors des simulations, nous allons répartir l'énergie de N photons dans les différents réceptacles de la matrice A et du bord $Bord$. Comme chaque photon distribuera une quantité d'énergie $P_w = 1$, nous aurons en fin de simulation que :

$$\sum_{i=1}^{1000} \sum_{j=1}^{1000} A(i, j) + \sum_{i=1}^{1000} \sum_{j=1}^4 Bord(i, j) = N,$$

que nous normaliserons simplement en faisant :

$$\frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^{1000} \sum_{j=1}^{1000} A(i, j) + \sum_{i=1}^{1000} \sum_{j=1}^4 Bord(i, j) \right) = 1.$$

Nous obtenons ainsi une répartition de l'énergie totale. Nous remarquons qu'il est aussi possible de normaliser en divisant chaque coefficient par l'aire du réceptacle auquel il correspond. En faisant cela, nous obtenons alors la fraction d'énergie déposé par unité de surface.

Après ce traitement des résultats, il nous faut pouvoir les interpréter. Nous proposons alors deux méthodes de représentation, pour la matrice A .

La plus naturelle consiste à représenter A comme une surface avec $z = A(x, y)$. Cependant, comme nous le verrons par la suite, les coefficients de la matrice sont tous très faibles, sauf pour quelques coefficients proches de la source. Or, ces valeurs élevées rendent les variations des autres coefficients trop subtiles pour être appréciées avec une surface.

Une seconde méthode consiste alors à utiliser la fonction «*image*» de Matlab/Octave pour afficher A comme une image en nuance de gris (coloré ici en bleu-jaune). Cette représentation est très intéressante car elle permet d'appliquer un coefficient d'amplification afin de pouvoir afficher plusieurs niveaux de détail. En effet, la fonction «*image*» affiche des couleurs qui vont du bleu au jaune pour des valeurs entières dans $[0,100]$, ces valeurs correspondent à un pourcentage de jaune. Ceci entraîne que les valeurs comprises dans $[0,1]$ sont toutes de couleur bleu et les valeurs supérieures à 100 sont toutes jaunes. En utilisant un coefficient d'amplification approprié, nous pouvons afficher la nuance de jaune sur l'intervalle qui nous intéresse. Par exemple :

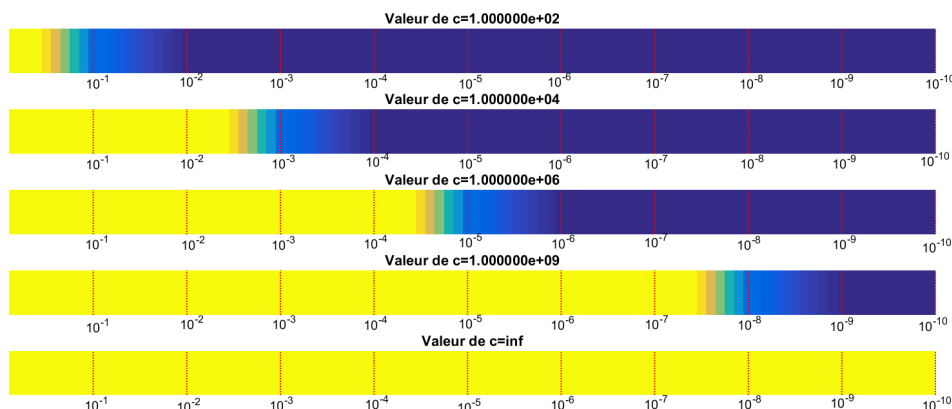


FIGURE 1 – Niveaux de détail en fonction de c

Ainsi, pour une valeur de $c = 10^4$, nous affichons la variation des coefficients compris dans $[10^{-2}, 10^{-4}]$ et pour des valeurs de c plus grandes, nous affichons les variations sur des intervalles de plus en plus petits. À noter que pour $c = \infty$, tous les coefficients différents de 0 vont prendre une valeur supérieure à 100 et vont donc être affichés en jaune. Cette technique nous permet d'afficher tous les coefficients non-nuls de la matrice (comme la fonction «*spy*»).

2 Modélisation d'un photon

2.1 Paramètres et initialisation des photons

Dans notre simulation, les photons sont définis par les paramètres suivants :

Px	Coordonnée en x
Py	Coordonnée en y
θ	l'angle courant
Pw	Quantité d'énergie
d	Distance à parcourir
$mort$	Booléen de contrôle

Les coordonnées du photon servent, comme leur nom l'indique, à définir la position du photon. Ces coordonnées sont initialisées avec les coordonnées de la source. Dans notre cas la source sera soit posée en $(0,0)$, pour nous permettre d'étudier le comportement global de la diffusion dans un milieu, soit en $(0, 60 - \frac{1}{\mu_s(1-g)})$. La seconde possibilité permet de modéliser une source de type laser injectée depuis le bord, nous considérons qu'une source ponctuelle située à une distance $\frac{1}{\mu_s(1-g)}$ du bord est une bonne approximation. Ensuite nous avons Pw qui correspond à la quantité d'énergie, cette quantité est relative, elle est initialisé à 1 pour chaque photon. Elle est incluse dans $[0,1]$.

Ce que nous appelons «l'angle courant» θ sert dans le cas de milieu anisotrope, nous reviendrons sur ce point dans la partie «Spin». Cet angle peut être initialisé avec une valeur fixe, afin de simuler un laser d'incidence normale au bord par exemple, ou peut-être aléatoire entre $[0, 2\pi]$ pour simuler une source de lumière ponctuelle au sein du domaine.

d est la distance du prochain saut qu'effectuera le photon. Enfin le booléen $mort$ sert à connaître l'état du photon, il est initialisé à 0 et passe à 1 lorsque le photon ne peut plus diffuser dans le milieu.

Soit pour chaque photon, le code commence par :

```
% initialisation du photon
Px = source(1);
Py = source(2);
Pw = 1;
%spin
theta = 2*pi*rand();
%theta = 3*pi/2;
mort=0;
```

2.2 Hop - Saut

A chaque étape, nous commençons par définir la distance que le photon va parcourir. Nous avons vu que la distance d parcourue par un photon suit une loi exponentielle $\mathcal{E}(\mu_t)$, nous allons donc nous servir de cette formule pour générer aléatoirement le saut du photon (hop). Soit $X \sim \mathcal{E}(\mu_t)$, sa densité f_X est donnée par :

$$f_X(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \mu_t e^{-\mu_t x} & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

Nous pouvons alors calculer sa fonction de répartition F_X :

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathbb{R}^+, \quad F_X(x) &= \int_{-\infty}^x f_X(t) dt = \int_0^x \mu_t e^{-\mu_t t} dt \\ &= \mu_t \left[-\frac{1}{\mu_t} e^{-\mu_t t} \right]_0^x \\ &= 1 - e^{-\mu_t x} \end{aligned}$$

La forme générale de la fonction de répartition est donc donnée par :

$$F_X(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0 \\ 1 - e^{-\mu_t x} & \text{si } 0 < x \end{cases}$$

Nous pouvons alors remarquer que la fonction de répartition est strictement décroissante sur $\mathbb{R}_+^*$, elle est donc bijective de $\mathbb{R}_+^*$ dans $]0, 1[$ et nous pouvons alors l'inverser :

$$\begin{aligned} \forall \xi \in]0, 1[, \quad \xi &= F_X(x) = 1 - e^{-\mu_t x} \\ \Leftrightarrow 1 - \xi &= e^{-\mu_t x} \\ \Leftrightarrow -\frac{\ln(\xi)}{\mu_t} &= x \end{aligned}$$

Ainsi, en prenant $\xi \sim \mathcal{U}([0, 1])$, nous avons $\zeta = 1 - \xi \sim \mathcal{U}([0, 1])$ et nous pouvons alors générer $d \sim \mathcal{E}(\mu_t)$ par :

$$d = -\frac{\ln(\zeta)}{\mu_t}$$

Nous pouvons noter que la valeur de d décroît rapidement en fonction de μ_t , pour des coefficients μ_a et μ_s élevés, nous devons nous attendre à des taches lumineuses très peu étendues. Comme nous le verrons par la suite, un milieu comme le crâne (scalp) représentera plutôt un obstacle à la diffusion de la lumière, alors que le LCR sera un milieu favorable à la diffusion en profondeur.

2.3 Drop - Dépôt d'énergie

Une fois choisie la distance à parcourir, nous déplaçons le photon suivant un angle donné. Pour le premier déplacement, cet angle peut-être fixé à l'avance ou choisi de façon aléatoire en fonction de ce que nous cherchons à modéliser.

Après avoir déplacé le photon, nous le faisons interagir avec le milieu. À son emplacement actuel, il dépose alors une fraction de son énergie qui correspond à l'absorption par le milieu. Cette fraction dépend de la nature du milieu et est déterminée par la formule :

$$P_w \times \frac{\mu_a}{\mu_t}$$

Nous allons alors recueillir cette énergie dans le réceptacle correspondant à la position courante.

Pour stocker cette énergie, nous divisons la position en x par le pas dx et y par dy , puis nous ajoutons 500 pour obtenir des indices entre 1 et 1000. Ainsi nous récupérons les indices correspondants à l'emplacement du réceptacle dans la matrice. Soit :

$$ix = \left\lfloor \frac{x}{dx} \right\rfloor + 500 \quad iy = \left\lfloor \frac{y}{dy} \right\rfloor + 500$$

Avec $\lfloor . \rfloor$ la fonction partie entière. Nous ajoutons alors simplement l'énergie absorbée dans la matrice et mettons à jour l'énergie du photon :

$$A(ix, iy) = A(ix, iy) + P_w \times \frac{\mu_a}{\mu_t}$$
$$P_w = P_w \times \left(1 - \frac{\mu_a}{\mu_t}\right)$$

Cette énergie restante va nous servir de critère d'arrêt pour la diffusion des photons. En effet, nous fixons un seuil $\epsilon = 10^{-4}$, si l'énergie du photon passe sous ce seuil, nous appelons la procédure «roulette» pour déterminer si la diffusion du photon est terminée.

2.4 Spin - Angle

Après son interaction avec le milieu, l'angle du photon va être modifié. Pour ce faire nous considérons deux cas.

Si le milieu est isotrope, l'angle précédent n'influe pas sur l'angle suivant. Dans ce cas nous avons juste à choisir un nouvel angle aléatoirement à l'aide d'une fonction uniforme sur $[0, 2\pi]$.

Si le milieu est anisotrope, nous devons alors prendre en compte l'angle actuel du photon. Dans ce cas, plutôt que de choisir un nouvel angle, nous allons créer une perturbation de l'angle actuel. Pour créer cette perturbation, nous utilisons la fonction de Henyey-Greenstein donnée par :

$$p(\cos \theta) = \frac{1 - g^2}{2(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \times \mathbb{1}_{]-1, 1[}(\cos \theta)$$

Avec $g \in]-1, 1[$ le coefficient d'anisotropie. Nous posons $u = \cos \theta \in]-1, 1[$. Nous allons vérifier que la fonction forme bien une densité de probabilité et nous allons voir comment la générer par inversion de la fonction de répartition. Nous commençons par montrer que c'est une densité de probabilité, soit :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} p(u) du &= \frac{1 - g^2}{2} \int_{-1}^1 \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2gu)^{\frac{3}{2}}} du \\ &= \frac{1 - g^2}{2} \left[\frac{1}{-\frac{1}{2}(-2g)(1 + g^2 - 2gu)^{\frac{1}{2}}} \right]_{-1}^1 \\ &= \frac{1 - g^2}{2g} \left(\frac{1}{(1 + g^2 - 2g)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{(1 + g^2 + 2g)^{\frac{1}{2}}} \right) \\ &= \frac{1 - g^2}{2g} \left(\frac{1}{1 - g} - \frac{1}{1 + g} \right) \\ &= \frac{2g(1 - g^2)}{2g(1 - g)(1 + g)} = 1 \end{aligned}$$

comme de plus, $\forall u \in]-1, 1[, p(u) > 0$, nous avons bien que p forme une densité de probabilité. Nous proposons alors de calculer sa fonction de répartition :

$$\begin{aligned} F(u) &= \int_{-\infty}^u p(t) dt = \frac{1 - g^2}{2} \int_{-1}^u \frac{1}{(1 + g^2 - 2gt)^{\frac{1}{2}}} dt \\ &= \frac{1 - g^2}{2} \left[\frac{1}{-\frac{1}{2}(-2g)(1 + g^2 - 2gt)^{\frac{1}{2}}} \right]_{-1}^u \\ &= \frac{1 - g^2}{2g} \left(\frac{1}{(1 + g^2 - 2gu)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{(1 + g^2 + 2g)^{\frac{1}{2}}} \right) \end{aligned}$$

Nous remarquons que p est strictement positive sur $] -1, 1[$, ainsi sa fonction de répartition est strictement croissante sur $] -1, 1[$ et donc bijective. Nous pouvons alors l'inverser. Soit $x \in]0, 1[$, nous avons :

$$\begin{aligned}
x &= F(u) = \frac{1-g^2}{2g} \left(\frac{1}{(1+g^2-2gu)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{(1+g^2+2g)^{\frac{1}{2}}} \right) \\
\Leftrightarrow \quad \frac{2xg}{1-g^2} &= \frac{1}{(1+g^2-2gu)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{1+g} \\
\Leftrightarrow \quad \frac{2xg}{1-g^2} + \frac{1}{1+g} &= \frac{1}{(1+g^2-2gu)^{\frac{1}{2}}} \\
\Leftrightarrow \quad \frac{2xg(1+g) + (1-g^2)}{(1+g)(1-g^2)} &= \frac{1}{(1+g^2-2gu)^{\frac{1}{2}}} \\
\Leftrightarrow \quad \left(\frac{(1+g)(1-g^2)}{2xg(1+g) + (1-g^2)} \right)^2 &= 1+g^2-2gu \\
\Leftrightarrow \quad u &= \frac{1}{2g} \left(1+g^2 - \left(\frac{1-g^2}{2xg+1-g} \right)^2 \right)
\end{aligned}$$

En utilisant une variable aléatoire $X \sim \mathcal{U}([0, 1])$, nous pouvons alors générer une variable U suivant la loi définie par la fonction de Henyey-Greenstein.

$$U = \frac{1}{2g} \left(1+g^2 - \left(\frac{1-g^2}{2Xg+1-g} \right)^2 \right)$$

Nous définissons alors la perturbation θ_p par :

$$\arccos(U) = \arccos(\cos(\theta_p)) = \theta_p$$

Finalement pour appliquer la perturbation au photon, nous utilisons une variable aléatoire ξ à valeur dans $\{-1, 1\}$ avec probabilité $\frac{1}{2}$, nous faisons :

$$\theta = \theta + \xi \times \theta_p$$

Dans le cas des simulations 3D, la trajectoire du photon est définie par deux angles, nous n'utilisons pas de variable ξ . C'est la rotation aléatoire sur $]0, 2\pi[$ de l'angle azimutal autour de θ , qui joue le rôle de ξ .

L'angle du photon est ainsi modifié, nous revenons alors à l'étape (2.2) et nous répétons la séquence Hop-Drop-Spin tant que l'énergie du photon le permet.

2.5 Roulette

Comme introduite dans la partie (2.3), la roulette est une procédure qui va déterminer l'arrêt de la diffusion de chaque photon. L'idée est la suivante : dans 90% des cas une fois l'énergie du photon sous le seuil, celle-ci est mise à zéro, le photon est considéré comme «mort» et nous passons au photon suivant. Dans les 10% des cas restants, l'énergie du photon est multipliée par 10 et sa diffusion continue. Cette procédure sert à conserver l'énergie totale. En effet, pour chaque photon nous supprimons une petite partie de l'énergie totale, donc pour un nombre de photon très élevé, cela représente une fraction non négligeable. Avec cette procédure, nous regroupons l'énergie résiduelle de plusieurs photons pour la remettre dans un photon.

Pour ce faire, nous utilisons simplement une variable aléatoire uniforme ξ sur $[0,1]$ et nous effectuons un test, si nous avons $\xi < 0.1$ alors l'énergie est multipliée par 10, sinon l'énergie passe à 0.

3 Interaction des photons

Dans le cas d'une simulation avec un domaine infini, les étapes précédentes suffiraient à la modélisation. Cependant, notre objectif final est de simuler la propagation de la lumière dans des milieux finis. Il nous faut alors définir les interactions qui peuvent avoir lieu avec le bord du domaine.

Lorsque deux milieux de nature différente sont adjacents, ils présentent une interface. Si ces deux milieux possèdent un indice de réfraction différent, alors un rayon lumineux passant par l'interface subira des altérations. En effet, une partie du rayon sera transmise d'un milieu à l'autre avec un changement d'angle et l'autre partie sera réfléchie.

On considère deux milieux m_1 et m_2 respectivement d'indice de réfraction n_1 et n_2 . Soit un rayon lumineux allant de m_1 vers m_2 , d'angle incident θ_i et d'angle transmis θ_t . D'après la formule de Fresnel, on a que :

$$n_1 \sin(\theta_i) = n_2 \sin(\theta_t)$$

Ce que l'on peut illustrer de cette façon :

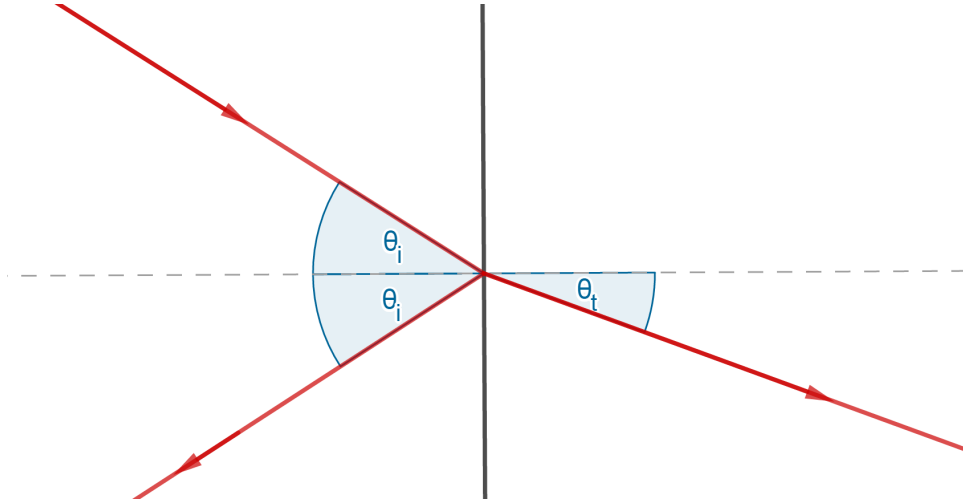


FIGURE 2 – Illustration formule de Fresnel

Pour déterminer l'intensité du rayon réfléchi, nous utilisons le coefficient de réflexion de Fresnel donné par :

$$R(\theta_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\theta_i - \theta_t)}{\sin^2(\theta_i + \theta_t)} + \frac{\tan^2(\theta_i - \theta_t)}{\tan^2(\theta_i + \theta_t)} \right]$$

Comme nous ne considérons qu'une seule particule à la fois, nous ne pouvons pas la séparer en deux fractions. Nous interprétons alors le coefficient de réflexion de Fresnel comme une probabilité de sortir du milieu, de paramètre θ_i .

Ainsi, lorsque qu'un photon arrive sur un bord, il nous suffit de calculer $R(\theta_i)$ et d'utiliser une variable aléatoire ξ uniforme dans $[0,1]$. Nous avons alors deux cas :

- Si $\xi \leq R(\theta_i)$, alors le photon est réfléchi dans le domaine
- Si $\xi > R(\theta_i)$, alors le photon sort du domaine

3.1 Sortie du milieu

Dans le cas où le photon sort du domaine c'est simple. Il nous suffit de calculer la position du point de sortie (x, y) , ensuite comme pour la matrice nous utilisons :

$$ix = \left\lfloor \frac{x}{dx} \right\rfloor + 500 \quad iy = \left\lfloor \frac{y}{dy} \right\rfloor + 500$$

Nous utilisons ix comme indice si c'est une sortie par un bord horizontal et iy si c'est une sortie par un bord latéral. Une fois l'indice du réceptacle de *Bord* récupéré, nous y versons toute l'énergie du photon, celle-ci passe alors à 0 et nous passons au photon suivant.

3.2 Réflexion sur une interface

Dans le cas où le photon est réfléchi, il nous faut calculer son nouvel angle, en suivant l'idée du schéma précédent. Nous travaillons avec des angles orientés, nous devons alors distinguer deux cas de réflexion : bord supérieur-inférieur et bord droit-gauche.

Nous posons V le vecteur de trajectoire de notre photon, tel que $\|V\| = d$ (d la distance à parcourir). Nous posons ensuite (x_0, y_0) la position actuelle du photon, (x_1, y_1) la position de l'impact du photon sur le bord et (x_2, y_2) sa position après réflexion.

3.2.1 Réflexion sur bord latéral

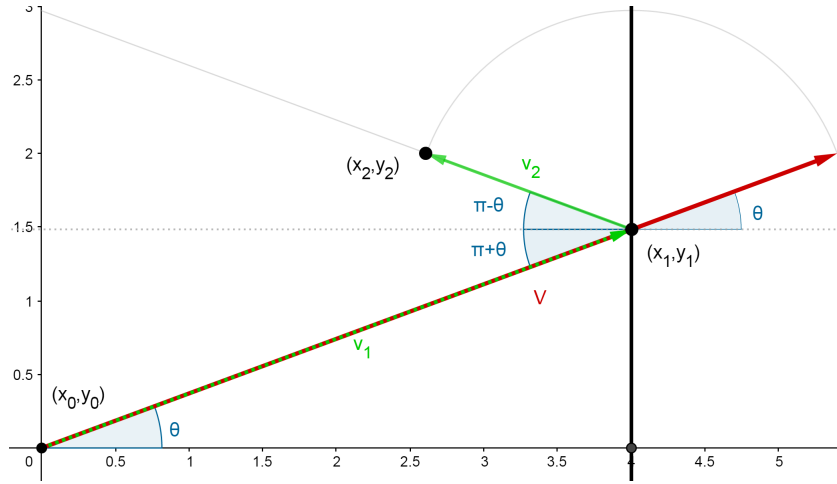


FIGURE 3 – Réflexion bord droit

Nous commençons par le cas d'une réflexion par le bord droit. Ici nous connaissons donc la coordonnée x_1 qui correspond à la position du bord. En se plaçant dans le triangle rectangle formé par le vecteur v_1 avec l'axe des abscisses, nous pouvons déterminer y_1 par la formule :

$$\tan(\theta) = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \iff y_1 - y_0 = (x_1 - x_0) \tan(\theta)$$

Une fois les coordonnées du point (x_1, y_1) calculées, nous pouvons nous en servir pour déterminer $\|v_1\|$ tel que :

$$\|v_1\| = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}$$

Nous en déduisons :

$$\|V\| = \|v_1\| + \|v_2\| = d \iff \|v_2\| = d - \|v_1\|$$

Enfin, à l'aide de la paramétrisation d'un cercle de centre (x_1, y_1) et de rayon $\|v_2\|$, nous trouvons :

$$\begin{cases} x_2 = \|v_2\| \cos(\pi - \theta) + x_1 \\ y_2 = \|v_2\| \sin(\pi - \theta) + y_1 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} x_2 = \left(d - \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + ((x_1 - x_0) \tan(\theta))^2}\right) \cos(\theta - \pi) + x_1 \\ y_2 = \left(d - \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + ((x_1 - x_0) \tan(\theta))^2}\right) \sin(\theta - \pi) + (x_1 - x_0) \tan(\theta) + y_0 \end{cases}$$

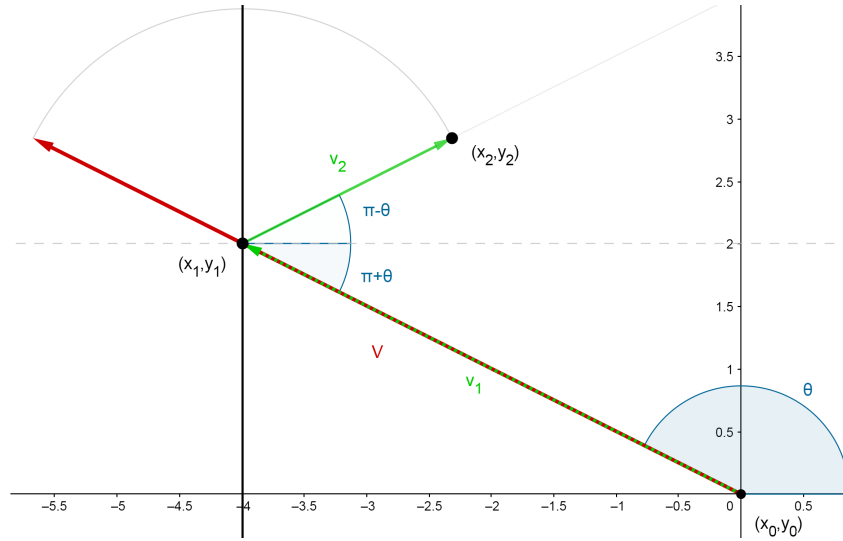


FIGURE 4 – Réflexion bord gauche

Nous pouvons observer sur le schéma ci-dessus que la formule reste la même pour la réflexion sur le bord gauche.

3.2.2 Réflexion sur bord sup/inf

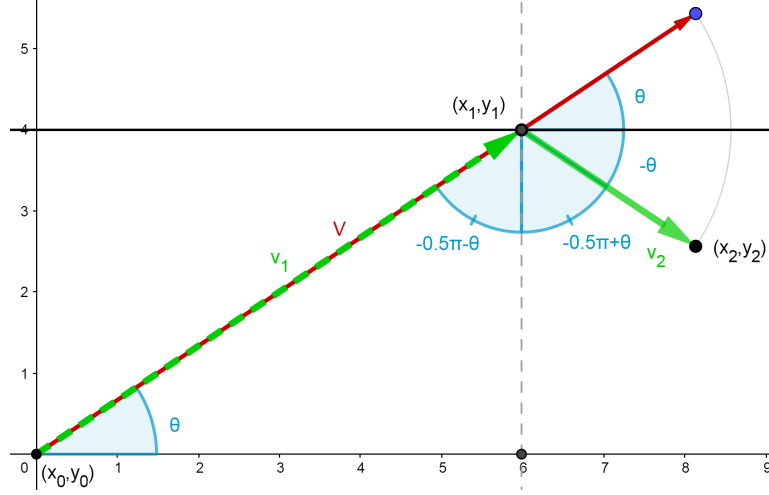


FIGURE 5 – Réflexion bord supérieur

Cette fois-ci, c'est la coordonnée y_1 que nous donne la position du bord. Nous nous plaçons encore dans le triangle rectangle défini par le vecteur V avec l'axe des abscisses, nous avons alors que :

$$\tan(\theta) = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \iff x_1 - x_0 = \frac{y_1 - y_0}{\tan(\theta)}$$

Comme précédemment, nous utilisons les coordonnées du point (x_1, y_1) que nous venons de calculer pour déterminer $\|v_2\|$, nous retrouvons :

$$\|v_2\| = d - \|v_1\| = d - \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}$$

Nous utilisons alors la formule de paramétrisation d'un cercle de centre (x_1, y_1) et de rayon $\|v_2\|$, nous trouvons :

$$\begin{cases} x_2 = \|v_2\| \cos(\pi - \theta) + x_1 \\ y_2 = \|v_2\| \sin(\pi - \theta) + y_1 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} x_2 = \left(d - \sqrt{\left(\frac{y_1 - y_0}{\tan(\theta)} \right)^2 + (y_1 - y_0)^2} \right) \cos(\theta - \pi) + \frac{y_1 - y_0}{\tan(\theta)} + x_0 \\ y_2 = \left(d - \sqrt{\left(\frac{y_1 - y_0}{\tan(\theta)} \right)^2 + (y_1 - y_0)^2} \right) \sin(\theta - \pi) + y_1 \end{cases}$$

La formule obtenue reste vraie dans le cas d'une réflexion sur le bord inférieur.

Nous obtenons ainsi les deux formules permettant de calculer les réflexions des photons sur le bord.

3.3 Interactions multiples

Si un photon est situé près d'un coin du domaine, il se peut qu'après une première réflexion, celui-ci se retrouve encore en dehors du domaine. Pour y remédier, plutôt que d'utiliser une simple conditionnelle pour tester la sortie du milieu, nous utilisons une boucle *while* qui s'arrête lorsque le photon est dans le domaine ou qu'il meurt. Voici alors le code pour les interactions avec les bords :

```
while ( abs(tPx) > 60 || abs(tPy) > 60 ) && mort ==0 ) %sorti du domaine ?

    xi = rand(); % indice refraction n_a=1,000272 et corps n_c=1.3

    if abs(tPx) > 60 % ----- SORTIE LATÉRALE ?
        [R,theta_t] = Fresnel_reflection_coef(theta,n_c,n_a);
        if(xi<R) % ----- REFLEXION LATÉRALE
            [tPx,tPy,bord] = rebond_lateral(theta,sign(tPx)*60,Px,Py,d);
        else
            if tPx>60 % ----- SORTIE DROITE
                iy = round(Py/dy)+NY/2+1;
                Bord(iy,1)=Pw;
                mort=1;
            elseif tPx<-60 % --- SORTIE GAUCHE
                iy = round(Py/dy)+NY/2+1;
                Bord(iy,3)=Pw;
                mort=1;
            end
        end
    end

    if abs(tPy) > 60 % ----- SORTIE HORIZONTALE ?
        [R,theta_t] = Fresnel_reflection_coef_sup(theta,n_c,n_a);
        if(xi<R) % ----- REFLEXION HORIZONTALE
            [tPx,tPy,bord] = rebond_hori(theta,sign(tPy)*60,Px,Py,d);
        else
            if tPy>60 % ----- SORTIE SUP
                ix = floor(Px/dx)+NX/2+1;
                Bord(ix,2) = Pw;
                mort=1;
            elseif tPy<-60 % --- SORTIE INF
                ix = floor(Px/dx)+NX/2+1;
                Bord(ix,4) = Pw;
                mort=1;
            end
        end
    end
end
```

4 Diagramme et schéma récapitulatif

Afin de bien comprendre la succession des étapes de la simulation, nous représentons cela sous forme de diagramme.

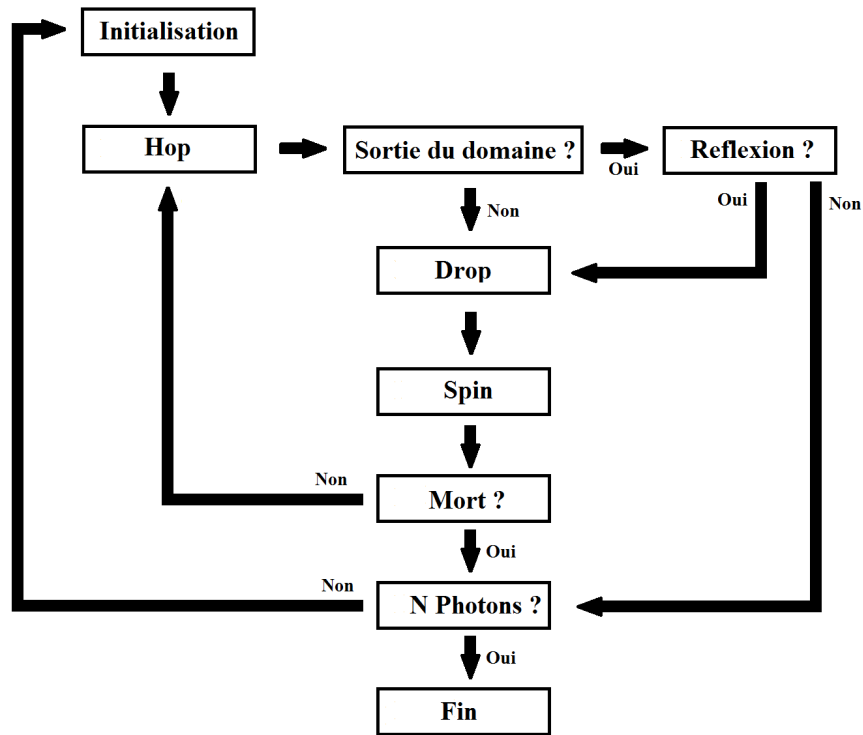


FIGURE 6 – Diagramme des étapes de la simulation

Nous retrouvons toutes les étapes décrites précédemment, ainsi que les tests effectués. L'étape «Roulette» est ici intégrée au test «Mort?».

Nous proposons un schéma représentant les 4 premiers déplacements d'un photon :

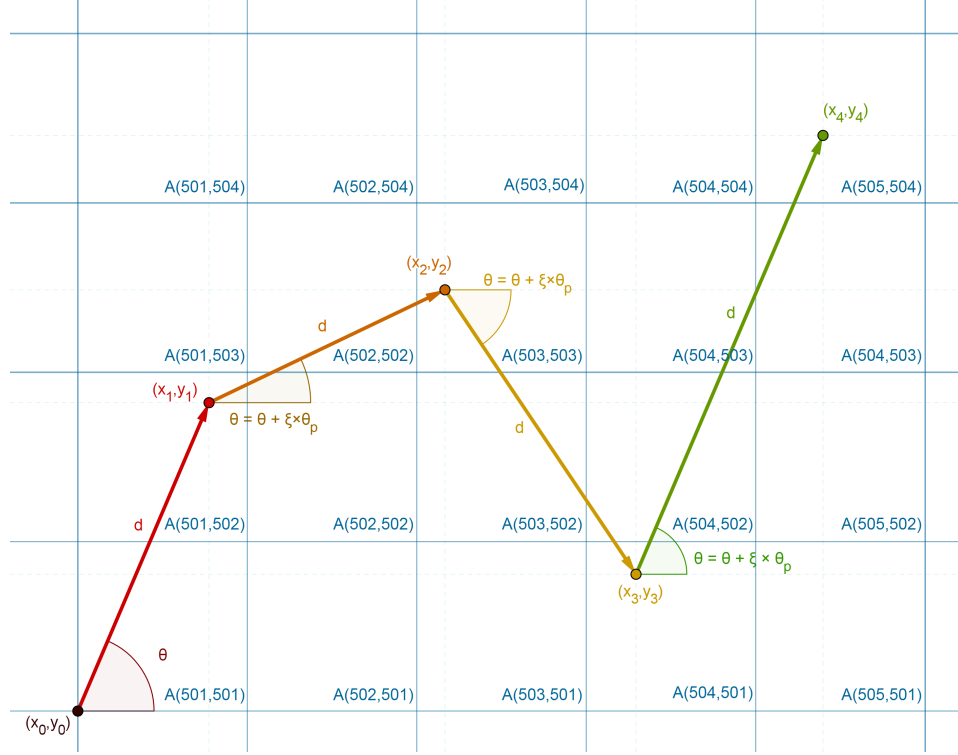


FIGURE 7 – Schéma de déplacement d'un photon

Sur ce schéma, la position du photon est initialisée à une source placée en (x_0, y_0) . Nous supposons ici que l'angle initial θ est choisi aléatoirement. Pour effectuer son premier déplacement (en rouge), nous générons la distance à parcourir d selon l'étape «Hop» (2.2). La position du photon devient alors (x_1, y_1) .

Comme nous pouvons le voir, le photon arrive alors dans la cellule $A(501, 502)$ de la matrice. C'est donc cette cellule qui reçoit le «Drop» (2.3) du photon. Une fois l'énergie du photon mise à jour, nous perturbons l'angle θ du photon avec le «Spin» (2.4). Puis Nous recommençons ces étapes tant que l'énergie du photon ne passe pas sous le seuil, ou qu'il ne s'échappe pas du domaine.

Une fois que nous avons simulé le nombre de photons souhaités, il nous reste alors à normaliser A pour en interpréter les résultats.

Deuxième partie

Utilisation du code

5 Effet des paramètres

Maintenant que nous avons mis en place les différents aspects théoriques du programme, nous allons l'utiliser avec divers paramètres afin de bien comprendre leurs rôles.

5.1 Influence du nombre de photons

Le premier paramètre, et sans doute le plus important, est le nombre de photons. Pour ces premières simulations, nous fixons la source à l'origine, nous décidons de fixer $\mu_s = 16[mm^{-1}]$, $\mu_a = 0.016[mm^{-1}]$ et $g = 0.9$. Avec ces paramètres nous allons réaliser plusieurs simulations pour des valeurs de N égale à 10, 100 et 10000.

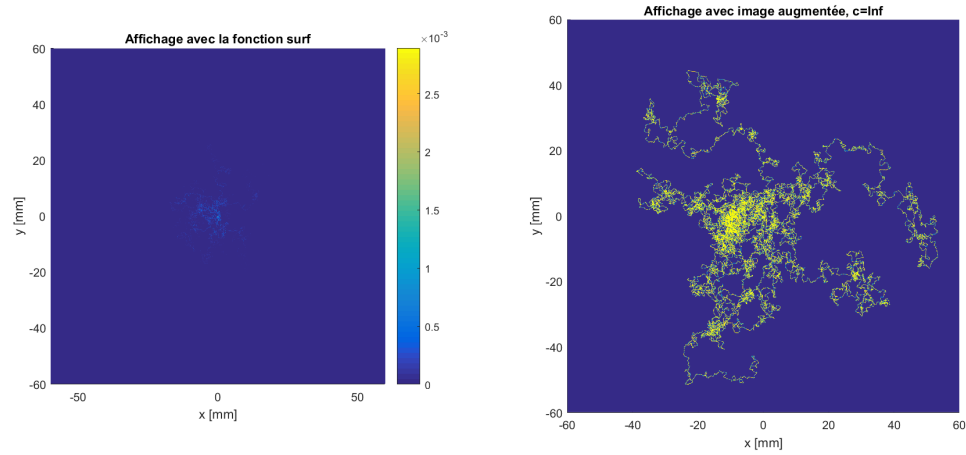


FIGURE 8 – Affichage pour $n = 10$

Avec ce premier affichage, nous pouvons déjà constater que les valeurs des coefficients de la matrice A sont faibles, le maximum étant de 3×10^{-3} . De plus l'image de droite représente la matrice sous forme de nuance de gris avec un coefficient d'amplification. Ici nous avons mis le coefficient d'amplification $c = \infty$, ce qui nous permet de voir toutes les positions de A avec un coefficient non nul.

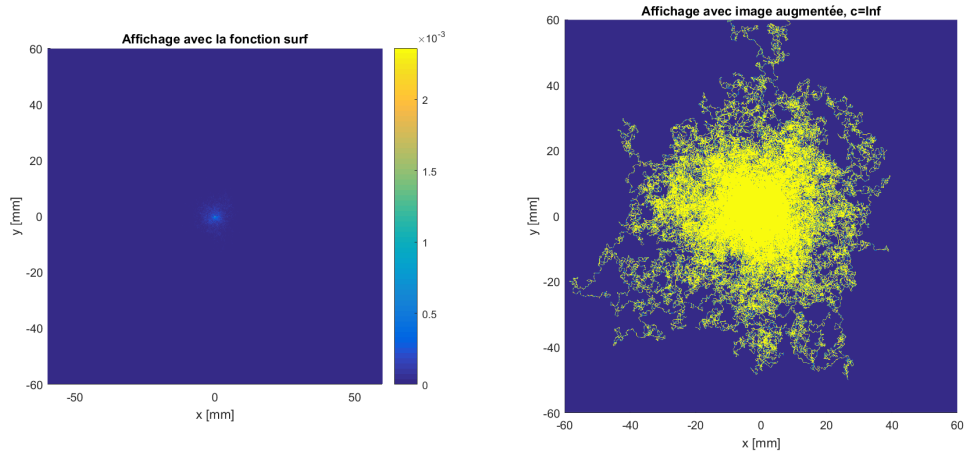


FIGURE 9 – Affichage pour $n = 100$

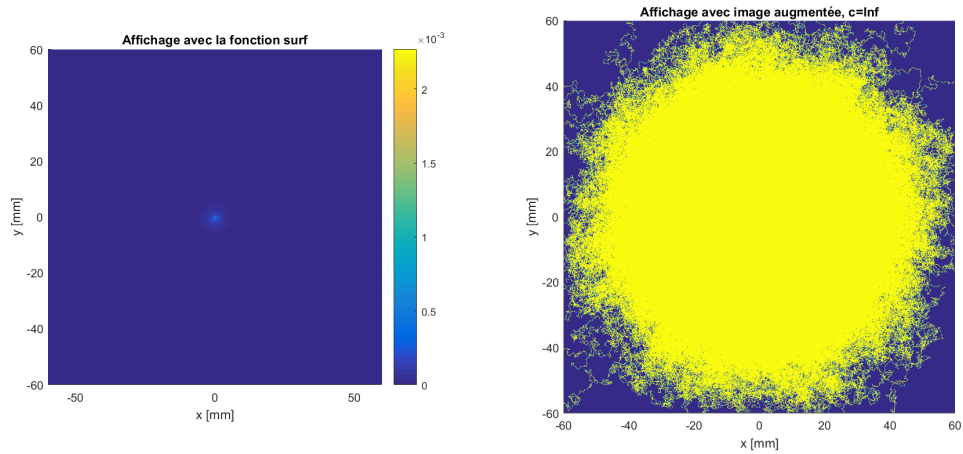


FIGURE 10 – Affichage pour $n = 10000$

Nous voyons d'après ces affichages que l'aire recouverte par l'ensemble des photons, ie les images de droite, augmente très largement lorsque nous augmentons le nombre de photons. Pourtant les images de gauche, représentant A comme une surface, ne varient que très peu. Ceci signifie que le nombre de photon ne change pas la forme de A , ce qui est rassurant

N	temps min/p	temps moy/p	temps max/p	temps total
10	0.0037	0.0071	0.0198	0.0719
100	0.0034	0.0039	0.0192	0.3996
10000	0.0031	0.0035	0.0190	35.5574

TABLE 1 – Tableau des résultats pour plusieurs valeurs de N

Comme nous pouvons le voir sur le tableau, le nombre de photon influence naturellement le temps de simulation. Nous souhaitons alors estimer le temps total nécessaire pour un N donné. Pour cela nous effectuons d'autres simulations pour des valeurs de $N = 100, 200, \dots, 500$, sans changer les autres paramètres. Nous obtenons :

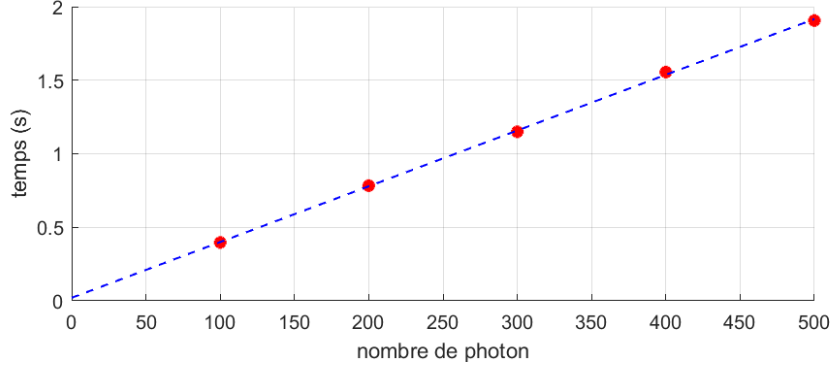


FIGURE 11 – Courbe du temps de simulation en fonction du nombre de photon

Le temps de simulation est linéaire en fonction du nombre de photons, avec ces paramètres nous avons :

$$t(N) = 0.003790 \times N$$

Comme la source est centrée, le nombre d'interactions avec les bords est très faible, nous pouvons ainsi les négliger. En faisant cela nous pouvons estimer le nombre d'étapes effectuées par un photon, noté N_{step} , par :

$$seuil = \left(\frac{\mu_s}{\mu_s + \mu_a} \right)^{N_{step}} \Leftrightarrow N_{step} = \frac{\ln(seuil)}{\ln\left(\frac{\mu_s}{\mu_s + \mu_a}\right)}$$

Nous pouvons alors estimer le temps de simulation par la formule :

$$t(N) = N \times t_{step} \times N_{step}$$

Dans notre cas, $t_{step} = 4.0885 \times 10^{-7} s$ et $N_{step} = 9726.6$, ce qui donne :

$$t(N) = 0.003976 \times N$$

Ici, le résultat théorique est très proche du résultat empirique obtenu, car les interactions avec le bord sont minimales. Ce résultat nous montre de plus que le temps de simulation dépend de μ_a et μ_s . Ainsi une faible valeur de μ_a , comme une grande valeur de μ_s fait augmenter le nombre d'étapes et par conséquent le temps de simulation.

5.2 Influence de l'absorption, la diffusion et l'anisotropie

Nous allons à présent nous intéresser aux influences des autres paramètres du milieu. Pour toutes les simulations qui suivent, nous utilisons $N = 10^4$ comme nombre de photons. Nous souhaitons observer le comportement des photons pour les paramètres μ_a , μ_s et g . Afin d'illustrer cela, pour chacun de ces paramètres nous effectuons 3 simulations pour des valeurs différentes.

Nous commençons avec le paramètre μ_a , nous fixons les autres paramètres $\mu_s = 16[\text{mm}^{-1}]$ et $g = 0.9$. Pour chacune des simulations nous recueillons le temps de simulation, le temps moyen par photon, le nombre d'étape par photon, la valeur du plus grand coefficient de A , ainsi que la fraction d'énergie totale restant dans le domaine E_A . Nous obtenons :

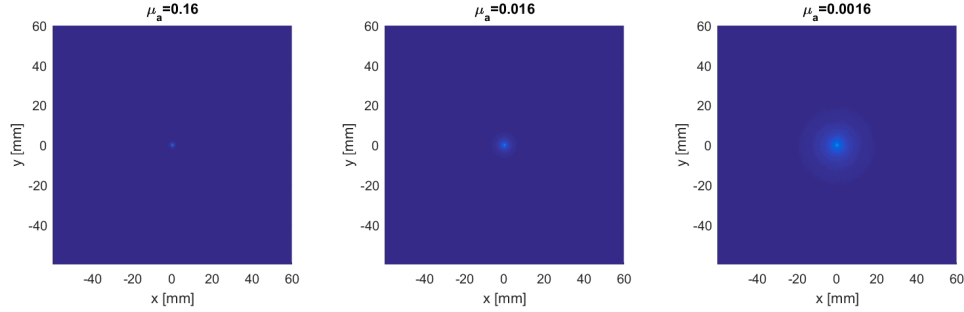


FIGURE 12 – Affichage pour différentes valeurs de μ_a , sans amplification

μ_a	t total (s)	t moy/p (s)	Nb étape/p	$\max(A)$	E_A (%)
0.16	3.5	3.52×10^{-4}	952	1.64×10^{-2}	99.9
0.016	34.9	3.49×10^{-3}	9 459	1.78×10^{-3}	99.9
0.0016	191.5	1.91×10^{-2}	49 745	1.89×10^{-4}	95.3
0.00016	207.9	2.07×10^{-2}	55 242	2.07×10^{-5}	39.0
0.000016	204.5	2.04×10^{-2}	54 474	2.04×10^{-5}	38.7

TABLE 2 – Résultats pour plusieurs valeurs de μ_a

Nous observons donc que pour un nombre de photon fixe, la valeur de μ_a influe grandement sur le temps de simulation. Car comme indiqué dans la partie précédente, une valeur de μ_a faible induit un grand nombre d'étapes ce qui augmente le temps de simulation par photon et donc le temps total. Cependant nous pouvons remarquer que passé un certain seuil, le nombre d'étapes et le temps de simulation semblent fixes.

Nous pouvons observer de plus qu'une faible absorption permet une meilleure dispersion de l'énergie. En effet, avec un μ_a élevé, l'énergie des photons est absorbée avant qu'ils puissent s'éloigner de la source. C'est aussi visible grâce au maximum de A , ainsi pour $\mu_a = 0.16$ un seul réceptacle

monopolise 1.64% de l'énergie totale, tandis que pour $\mu_a = 1.6 \times 10^{-5}$, le réceptacle contenant le plus d'énergie ne contient que 0.002% de l'énergie totale.

Nous nous intéressons cette fois à μ_s , nous fixons les autres paramètres $\mu_a = 0.016[\text{mm}^{-1}]$ et $g = 0.9$. Pour chaque simulation nous recueillons les mêmes informations que précédemment. Nous décidons d'afficher la position des coefficients non-nuls de la matrice, nous obtenons alors :

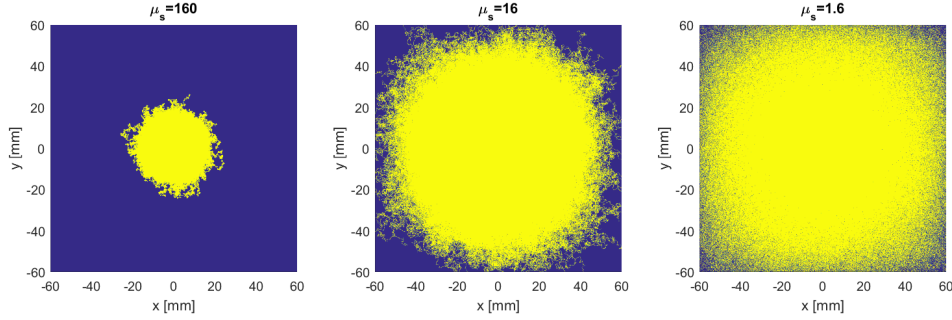


FIGURE 13 – Affichage pour différentes valeurs de μ_s , $c = \infty$

μ_s	t total (s)	t moy/p (s)	Nb étape/p	$\max(A)$	E_A (%)
160	349.3	3.49×10^{-2}	94 731	3.58×10^{-3}	99.9
16	36.5	3.65×10^{-3}	9 474	1.75×10^{-3}	99.9
1.6	2.5	2.48×10^{-4}	563	1.04×10^{-2}	96.9
0.16	0.2	2.1×10^{-5}	19	9.14×10^{-2}	76.5
0.016	0.1	1.3×10^{-5}	4	5.00×10^{-1}	83.6

TABLE 3 – Résultats pour plusieurs valeurs de μ_s

Nous observons que μ_s influe aussi sur le temps de simulation. Comme prévu, plus sa valeur est élevée, plus la simulation est longue. Cependant, contrairement à μ_s , nous ne voyons pas de seuil à partir duquel le temps de simulation se stabilise. En fait, l'évolution du nombre d'étape semble linéaire par rapport à μ_s , *a fortiori* le temps moyen par photon et le temps total le paraissent aussi.

Grâce aux affichages, nous pouvons voir que μ_s contrôle la distance des «sauts» effectués par les photons. En effet, la façon dont nous avons mis en place d , la distance à parcourir, dans la partie (2.2) ne dépend que de μ_s et décroît lorsque μ_s augmente.

Pour finir, avec les deux dernières lignes du tableau nous pouvons voir que pour des valeurs μ_s très faibles, les résultats ne semblent plus cohérents.

Enfin nous étudions maintenant g , nous fixons les autres paramètres $\mu_a = 0.016[mm^{-1}]$ et $\mu_s = 16[mm^{-1}]$. Pour chaque simulation nous recueillons les mêmes informations que précédemment, nous obtenons alors :

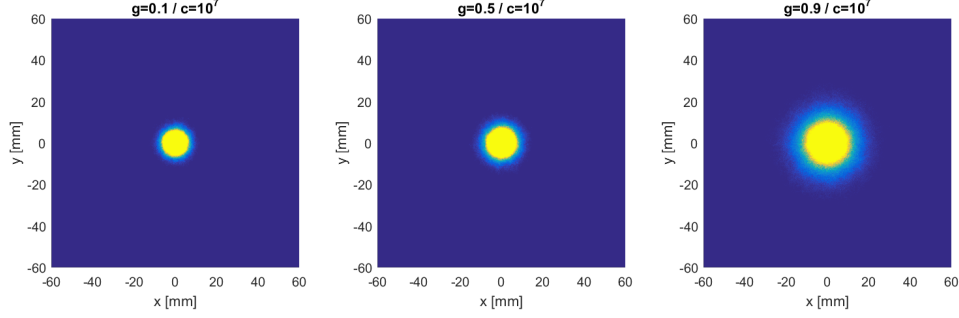


FIGURE 14 – Affichage pour différentes valeurs de g

g	t total (s)	t moy/p (s)	Nb étape/p	$\max(A)$	E_A (%)
0.1	35.1	3.51×10^{-3}	9 467	4.2×10^{-3}	99.9
0.3	35.1	3.51×10^{-3}	9 482	3.65×10^{-3}	99.9
0.5	34.7	3.47×10^{-3}	9 466	3.03×10^{-3}	99.9
0.7	34.9	3.49×10^{-3}	9 482	2.44×10^{-3}	99.9
0.9	34.8	3.48×10^{-3}	9 443	1.81×10^{-3}	99.9

TABLE 4 – Résultats pour plusieurs valeurs de g

D'après le tableau, g n'a aucune influence sur le temps de simulation. D'ailleurs tous les paramètres restent quasiment constants, excepté le maximum de A . En regardant les images de A , avec un coefficient d'amplification c , nous voyons que g semble avoir un impact sur la forme générale de la diffusion.

En réalité g n'intervient que dans la perturbation de l'angle θ . Plus g est proche de 1, moins l'angle est perturbé. Ce que nous observons alors sur la première image est dû au fait que pour $g = 0.1$, à chaque saut, perturber θ revient quasiment à le choisir aléatoirement dans $[0, 2\pi]$. Ceci fait que les photons ont tendance à «tourner en rond» autour de la source. Alors que pour $g = 0.9$, l'angle θ va subir de faibles perturbations, les photons vont donc pouvoir continuer leur trajectoire et s'éloigner de la source. Ceci est d'autant plus visible en prenant simplement un seul photon :

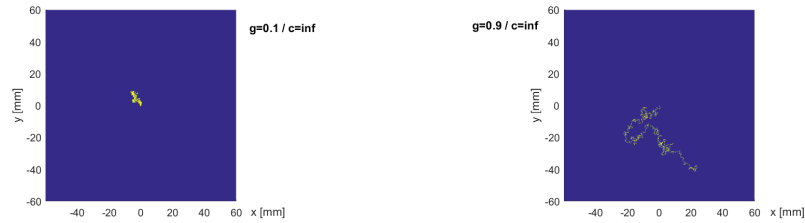


FIGURE 15 – Affichage d'un seul photon pour différentes valeurs de g

6 Étude de la convergence

Nous souhaitons à présent établir la convergence de notre méthode vers une unique solution lorsque N devient très grand. Pour ce faire, nous proposons une étude de différence relative. L'idée est la suivante : nous effectuons des simulations pour des valeurs de N très grandes et nous observons l'évolution de l'erreur relative. Nous posons les paramètres suivants, $\mu_a = 0.016[mm^{-1}]$, $\mu_s = 16[mm^{-1}]$ et $g = 0.9$. Nous posons $\mathcal{N}$ l'ensemble des valeurs de N que nous utilisons :

$$\mathcal{N} = \{10, 50, 100, 500, 1000, 5000, 10^4, 5 \times 10^4, 10^5, 5 \times 10^5, 10^6, 5 \times 10^6, 10^7, 3 \times 10^7\},$$

nous posons de plus $\bar{N} = \max_{N \in \mathcal{N}}(N) = 3 \times 10^7$ le nombre de photons de la plus longue simulation. Nous notons A_N la matrice associée à la simulation de N photons. Nous définissons ainsi les erreurs relatives 1 et ∞ :

$$E_N^1 = \|A_N - A_{\bar{N}}\|_1 \quad \text{et} \quad E_N^\infty = \|A_N - A_{\bar{N}}\|_\infty, \quad \forall N \in \mathcal{N}$$

Pour calculer ces erreurs, il nous faut à présent simuler un total de 46 666 660 photons. En prenant une source centrée, nous pouvons estimer le temps simulation par la formule de la partie (5.1), ce qui nous donne :

$$t(N) = 0.003976 \times N$$

$$t = 0.003976 \times 46\,666\,660 = 185\,546s \simeq 51h$$

Ce qui est un peu long. Pour résoudre ce problème, nous décidons de poser la source en $(0, 60 - \frac{1}{\mu_s(1-g)})$. En faisant cela, nous augmentons le nombre d'interactions avec le bord et donc le nombre de photons sortants rapidement du domaine. Cela a comme conséquence de réduire drastiquement le temps moyen par photon. Avec une simulation de $N = 10^4$ photons, nous estimons le temps moyen par photon à $t_{moy} = 4.86 \times 10^{-4}$, nous avons alors :

$$t(N) = 4.86 \times 10^{-4} \times N$$

$$t = 4.86 \times 10^{-4} \times 46\,666\,660 = 22\,680s \simeq 6.3h$$

Ce qui est envisageable. Après avoir effectué les simulations, nous proposons l'affichage de trois d'entre elles.

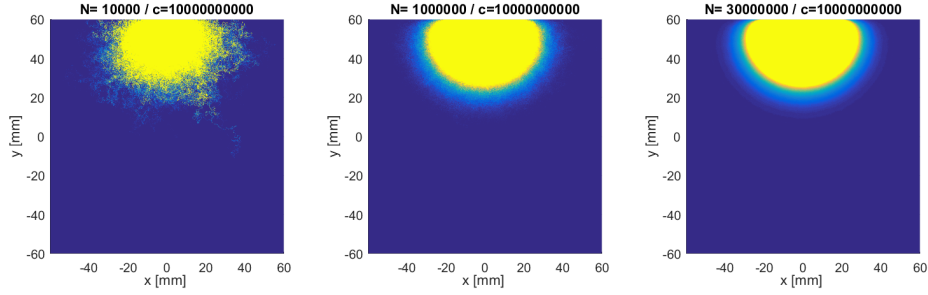


FIGURE 16 – Affichage pour différentes valeurs de N

Nous pouvons déjà apercevoir une sorte de convergence, il nous faut maintenant calculer cela précisément.

Nous calculons donc l'erreur comme indiqué précédemment. Nous utilisons les norme matricielles 1 et infinie, même si nous nous attendons au même genre de résultat pour les deux. Une fois toutes les erreurs calculées, nous les représentons sur un graphique :

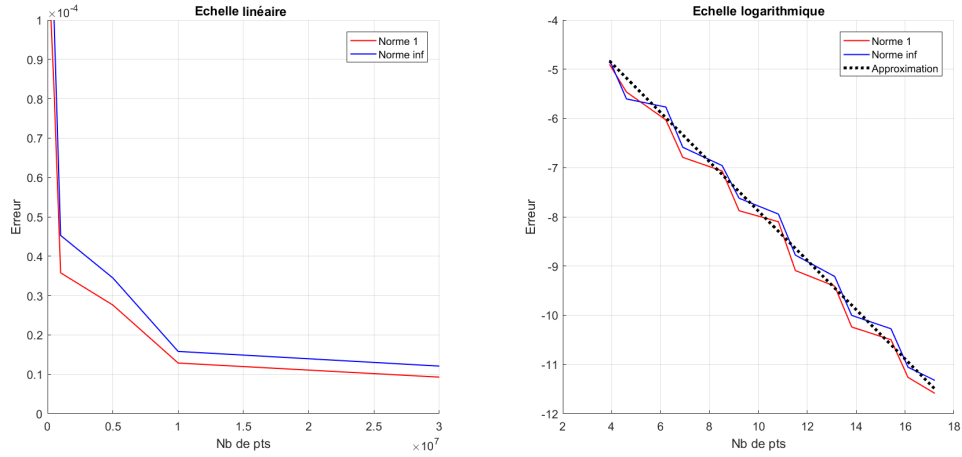


FIGURE 17 – Courbes d'erreur relative

Avec ces courbes nous pouvons voir qu'il y a effectivement convergence de la méthode vers une unique solution. De plus, en interpolant les courbes d'erreur en échelle logarithmique (droite en pointillés), nous pouvons estimer la, vitesse de convergence. Nous obtenons $\alpha = -0.501015$ comme coefficient directeur de la droite d'approximation, ce qui est l'ordre de convergence classique pour une méthode de Monte-Carlo. Nous en déduisons donc :

$$E_N^{1/\infty} = \|A_{\bar{N}} - A_N\|_{1/\infty} \simeq \mathcal{O}(N^{-\frac{1}{2}})$$

Ceci signifie que pour avoir des solutions avec une précision de 10^{-3} , il nous faut :

$$E_N = N^{-\frac{1}{2}} \simeq 10^{-3} \quad \Leftrightarrow \quad N \simeq 10^6$$

Soit des simulations avec au moins 10^6 photons.

7 Visualisation des différents milieux

Nous venons d'étudier l'influence des différents paramètres et nous avons établi la convergence de la méthode, nous proposons à présent de l'utiliser pour visualiser les milieux qui nous intéressent. Nous avons les listes de paramètres suivantes :

	Liste Montcel		Liste Wallois	
Type de tissu	$\mu_s [mm^{-1}]$	$\mu_a [mm^{-1}]$	$\mu_s [mm^{-1}]$	$\mu_a [mm^{-1}]$
Cuir chevelu (scalp)	19	0.018	19	0.018
Crâne (skull)	16	0.016	16	0.016
LCR (CSF)	2.4	0.004	0.32	0.0041
Matière grise	22	0.036	5	0.048
Matière blanche	91	0.014	10	0.037
Matière g/b	56.5	0.025	7.5	0.0425

TABLE 5 – Listes des coefficients utilisés

Nous allons donc calculer la solution de la diffusion de la lumière dans ces milieux. Nous n'afficherons pas les images pour la matière grise et la matière blanche, nous utiliserons plutôt la dernière ligne qui correspond à la moyenne des deux.

Nous choisissons pour ces simulations de prendre $N = 10^6$ photons, ainsi que $g = 0.9$ pour tous les milieux. Nous recueillons de plus le temps total, le nombre moyen d'étape et la fraction d'énergie restant dans le domaine. Nous obtenons alors :

Milieu	Temps total (s)	Nb moyen d'étape/p	E_A (%)
Wallois			
Scalp	3 732	9 956	99.9
Skull	3 488	9 461	99.9
LCR	13	29	35.1
MG	383	990	100
MB	966	2 562	99.9
MGMB	813	2 114	99.9
Montcel			
Scalp	3 732	9 956	99.9
Skull	3 488	9 461	99.9
LCR	538	1364	80.0
MG	2 128	5 7916	100
MB	22 688	61 543	100
MGMB	7 861	21 396	100

TABLE 6 – Résultats des simulations pour les différents coefficients

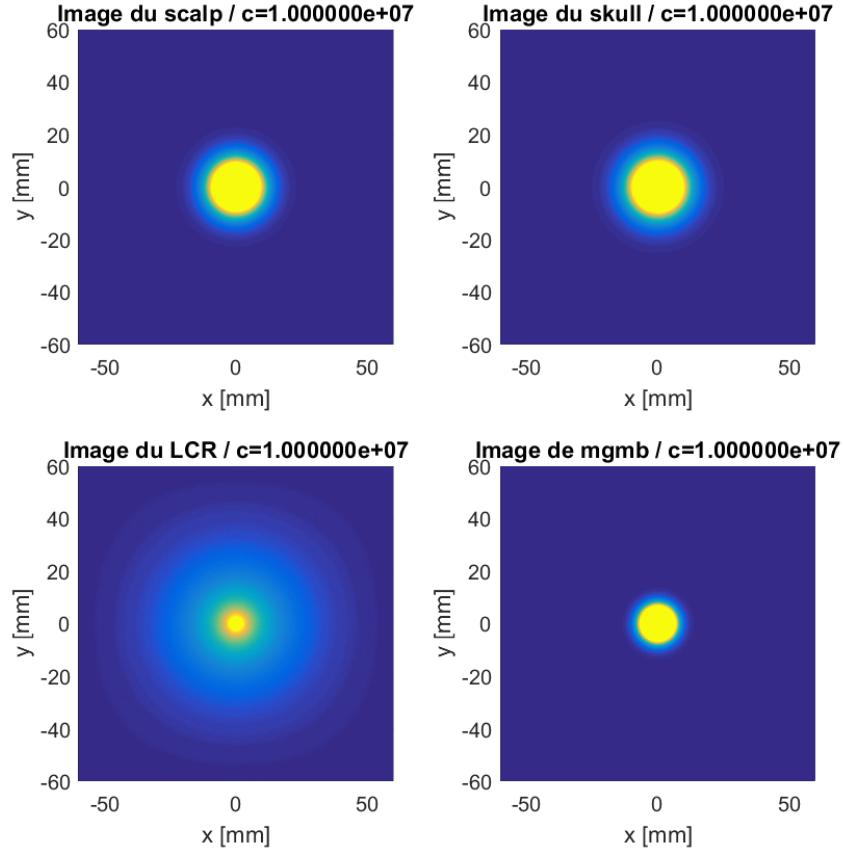


FIGURE 18 – Affichage des milieux avec coefficient Montcel

Nous voyons avec ces images le comportement global de chaque milieu. Pour le cuir chevelu et le crâne qui ont des coefficients à peu près similaires, nous observons des résultats très proches. Pour ce qui est du LCR, nous observons qu'avec son faible coefficient μ_a , le milieu n'absorbe qu'une faible partie de l'énergie totale, seulement 80.0%. Dû au faible coefficient μ_s qui fait que les photons vont rapidement atteindre les bords et pouvoir s'échapper du domaine. Enfin pour ce qui est du milieu MGMB nous observons une forte absorption, ce qui se traduit aussi par 99.9% de l'énergie totale absorbée dans le domaine.

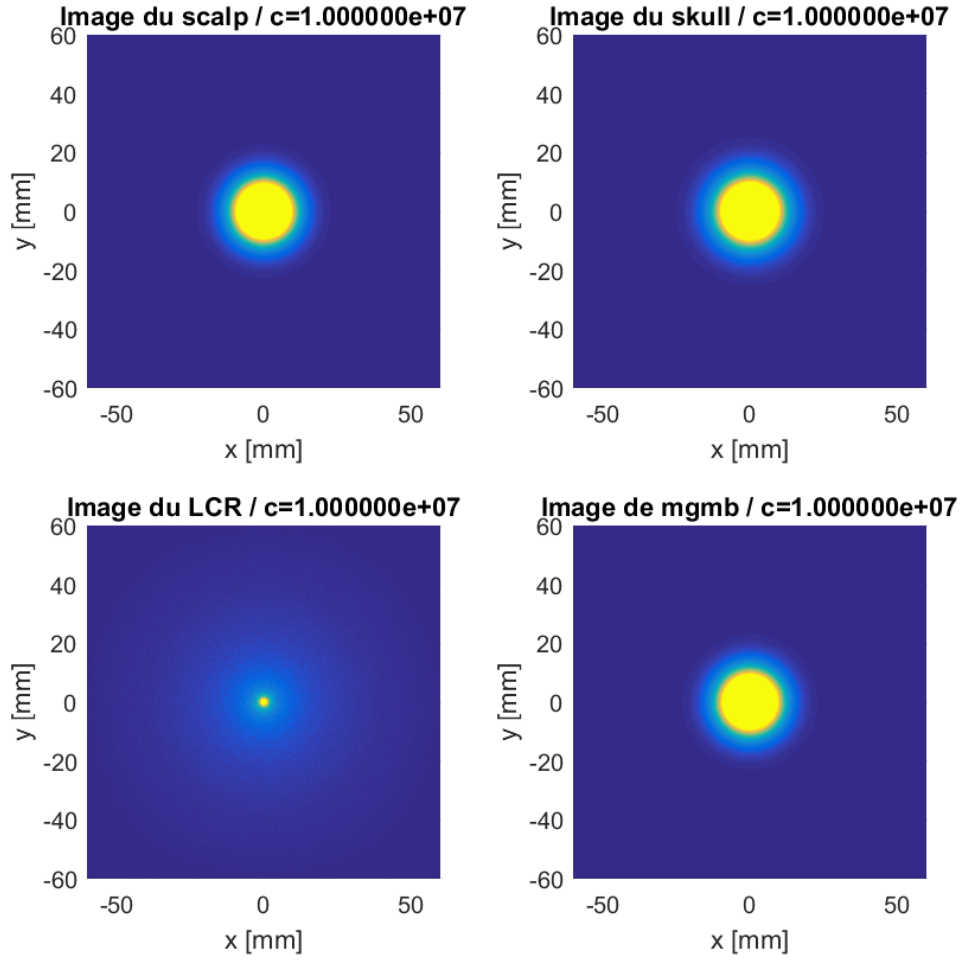


FIGURE 19 – Affichage des milieux avec coefficient Wallois

Avec ce set de coefficients, nous observons les mêmes comportements globaux. Cependant, il faut noter ici que l'absorption du LCR est beaucoup plus faible. Nous pouvons notamment voir dans le tableau de grosse différences pour ce milieu entre les deux sets de coefficients utilisés.

Nous proposons d'afficher les bords de plusieurs milieux afin de visualiser ce qui s'y passe. Nous représentons alors la valeur du coefficient contenu sur le bord en fonction de sa position en x pour les bords supérieur et inférieur, ou en y pour les bords gauche et droit. Nous affichons ainsi les bords pour le crâne et le LCR, avec les coefficients de Wallois.

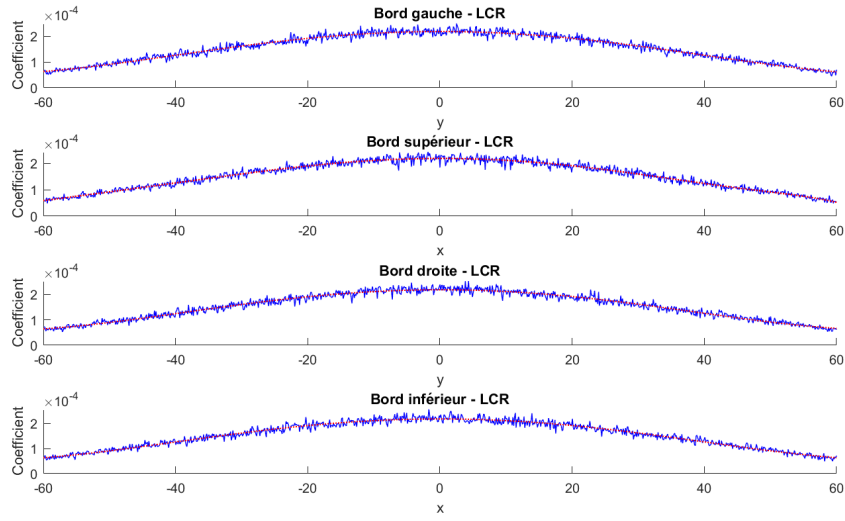


FIGURE 20 – Affichage des bords pour le LCR

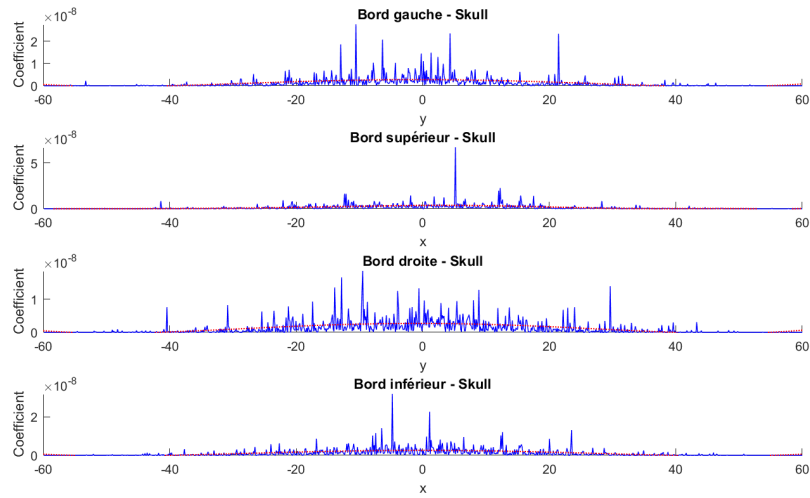


FIGURE 21 – Affichage des bords pour le crâne

L'affichage obtenu paraît cohérent. pour une source centrée nous avons des résultats très proches sur les quatre bords. De plus, les coefficients pour le LCR sont beaucoup plus grands que pour le scalp, ce qui explique qu'il y ait plus d'énergie qui quitte le domaine avec le LCR qu'avec le crâne.

8 Comparaison avec une solution analytique

8.1 Calcul de la solution analytique

Comme annoncé en introduction, nous nous intéressons à l'équation de la diffusion stationnaire dans un domaine infini comme approximation de l'équation de transfert radiatif. Cette équation est définie par :

$$-\nabla \cdot \kappa(x) \nabla \Phi(x) + \mu_a \Phi(x) = q(x)$$

où l'inconnue Φ représente la densité de photons, $\kappa(x) = \frac{1}{3(\mu_a + \mu'_s)}$ et $\mu'_s = \mu_s(1 - g)$. Nous posons q une source isotrope ponctuelle située en x_0 avec une intensité I_0 , soit :

$$q(x) = I_0 \delta_{x_0}$$

Nous remarquons que pour κ constant, ie sur un milieu homogène infini, nous obtenons :

$$\begin{aligned} -\kappa \nabla \cdot \nabla \Phi(x) + \mu_a \Phi(x) &= q(x) \\ -\Delta \Phi(x) - \left(-\frac{\mu_a}{\kappa} \Phi(x) \right) &= \frac{I_0}{\kappa} \delta_{x_0} \\ \Delta \Phi(x) + k^2 \Phi(x) &= -f(x) \end{aligned} \tag{1}$$

Nous reconnaissons alors une équation de Helmholtz avec la constante $k \in \mathbb{C}$ et la source f à support compact :

$$k^2 = -\frac{\mu_a}{\kappa} \Leftrightarrow k = i\sqrt{\frac{\mu_a}{\kappa}} \quad \text{et} \quad f(x) = \frac{I_0}{\kappa} \delta_{x_0}$$

Or pour l'équation de Helmholtz $-\Delta G - k^2 G = \delta_0$ en 2D, la solution est donnée par :

$$G(x) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k \times |x|)$$

avec $H_0^{(1)}$ la fonction de Hankel de première espèce. Nous en déduisons alors la solution Φ de l'équation (1) donnée par :

$$\Phi(x) = -\frac{iI_0}{4\kappa} H_0^{(1)}\left(i\sqrt{\frac{\mu_a}{\kappa}} \|x - x_0\|\right)$$

Sur l'axe imaginaire $i\mathbb{R}^+$, nous avons le comportement asymptotique suivant, pour $|x| \gg \frac{1}{4}$:

$$H_0^{(1)}(ir) \simeq -i\sqrt{\frac{2}{\pi x}} \exp(-x)$$

8.2 Comparaison avec la solution par Monte-Carlo

Nous souhaitons alors comparer cette solution analytique avec les résultats obtenus par nos simulations de Monte-Carlo. Pour que les résultats soient comparables, il nous faut des simulations sur des milieux homogènes infinis, il nous suffit pour cela de désactiver les interactions avec le bord. Nous effectuons alors des simulations pour le crâne, le LCR et la matière blanche, avec $N = 10^6$ photons et en utilisant les coefficients de Wallois.

Nous commençons par les observations sur la matière blanche. Une première représentation des données, que nous n'affichons pas, permet de calibrer. Pour ce calibrage, nous utilisons un coefficient $C \simeq 2000$ qui multiplie tous les coefficients de la matrice issue de la simulation. Ceci permet de superposer les courbes pour mieux visualiser leur comportement. Nous obtenons alors les résultats suivants :

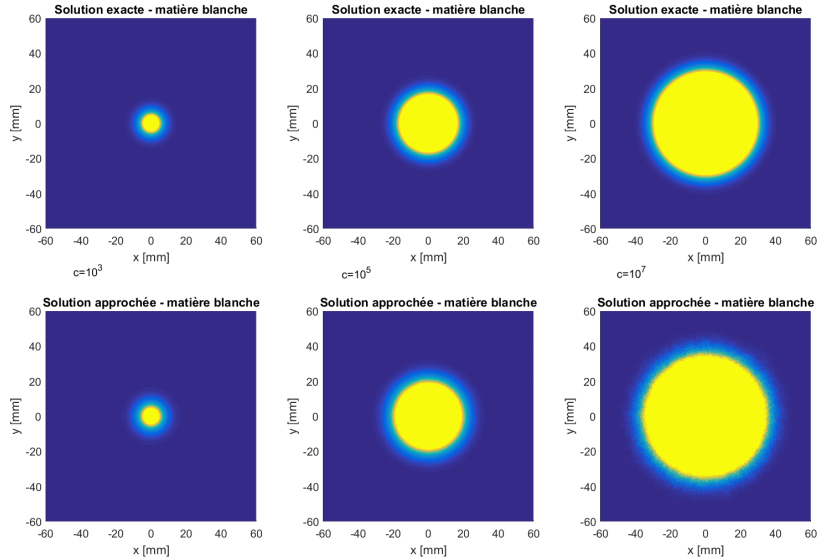


FIGURE 22 – Affiche SE/SA pour différents niveaux de détail pour la matière blanche

Avec ces premières images, nous pouvons déjà remarquer que les résultats obtenus avec la solution analytique, nommés solutions exactes et ceux obtenus avec la simulation, nommés solutions approchées, sont assez proches. Pour rendre compte de la différence entre les deux solutions, nous proposons une représentation dite «en coupe». C'est-à-dire que nous représentons la courbe de décroissance de la densité de photon partant de la source et en s'éloignant de celle-ci.

Nous obtenons alors les courbes suivantes :

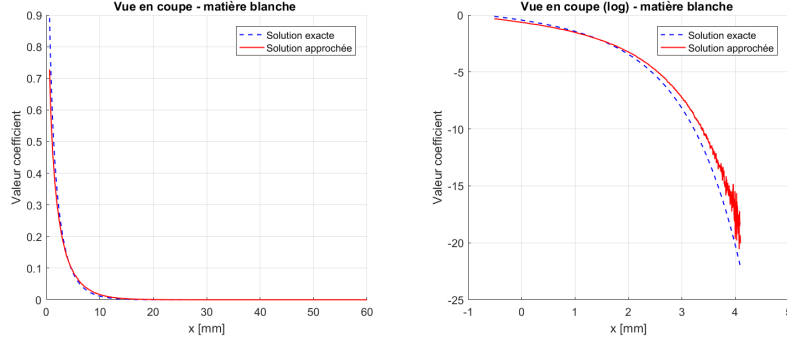


FIGURE 23 – Évolution de la densité de photon en fonction de la distance à la source pour la matière blanche, $C = 2000$

Avec le graphique de gauche en échelle linéaire, nous pouvons comparer les décroissances des deux courbes à proximité de la source. La courbe de droite, en échelle logarithmique, permet plutôt d'observer la décroissance à plus grande distance. Dans notre cas, les deux courbes semblent correspondre quelle que soit l'échelle utilisée. Nous noterons cependant une légère sur-évaluation de la méthode de Monte-Carlo pour de grandes distances.

Nous répétons alors la procédure avec le crâne. Nous commençons par les représentations avec différentes valeurs de c . Nous obtenons :

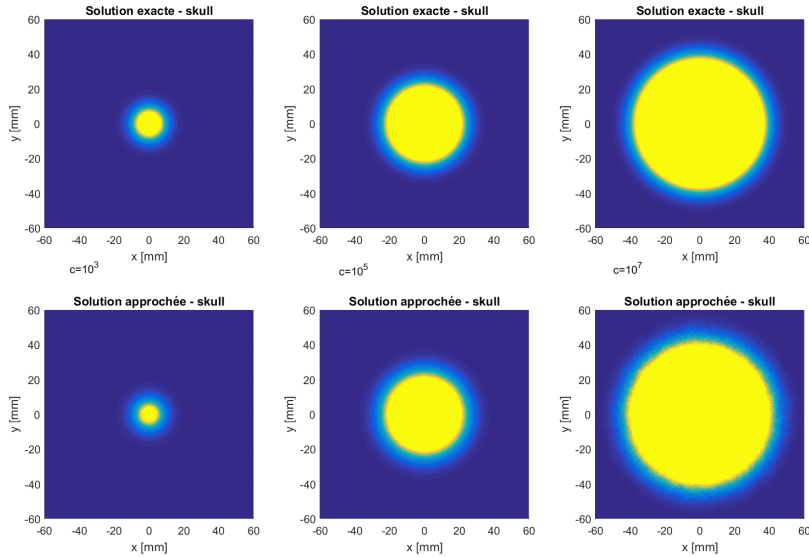


FIGURE 24 – Affiche SE/SA pour différents niveaux de détail pour la matière blanche

Sur ces affichages, nous pouvons déjà constater de très légères différences pour $c = 10^3$, ce qui signifie que les courbes ne semblent pas correspondre parfaitement à proximité de la source. Comme pour la matière blanche, nous décidons de représenter la décroissance «en coupe». Nous obtenons :

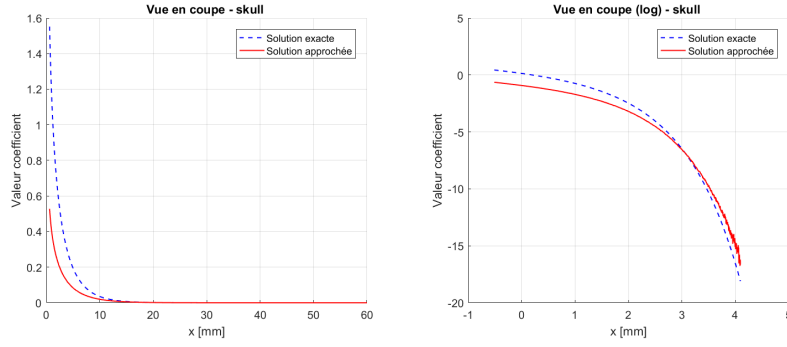


FIGURE 25 – Évolution de la densité de photon en fonction de la distance à la source pour le crâne, avec $C = 2000$

Les courbes ainsi obtenues confirment les premières images, puisque les deux solutions présentent une différence à proximité de la source. Cependant nous pouvons noter que le comportement global reste similaire. Comme le coefficient permettant de calibrer la courbe de la solution approchée a été choisi par rapport à la matière blanche, nous décidons de le changer pour faire correspondre au mieux les courbes pour le crâne. En prenant alors $C \simeq 5500$, nous obtenons cette fois-ci :

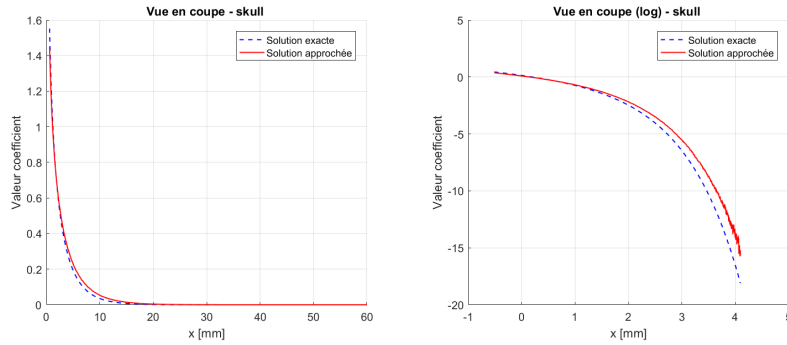


FIGURE 26 – Évolution de la densité de photon en fonction de la distance à la source pour le crâne, avec $C = 5500$

Nous retrouvons ici le même comportement que pour la matière blanche, c'est-à-dire un comportement similaire à proximité de la source et un légère sur-évaluation de la méthode Monte-Carlo à plus grande distance.

Enfin nous effectuons la même procédure avec le LCR. En reprenant $C = 2000$ comme coefficient de calibrage, nous obtenons alors :

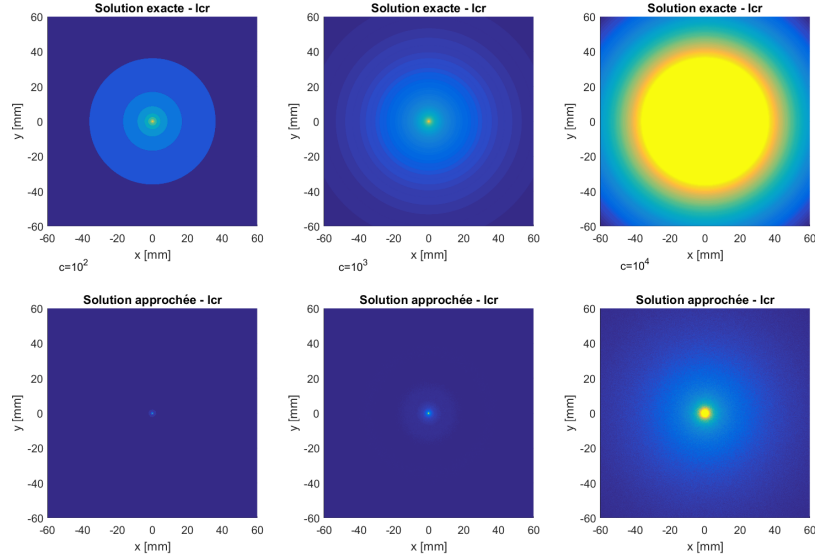


FIGURE 27 – Affiche SE/SA pour différents niveaux de détail pour le LCR

Cette fois-ci nous obtenons des résultats significativement différents. En effet, quel que soit le niveau de détail, les images sont complètement différentes. Nous représentons la décroissance «en coupe» :

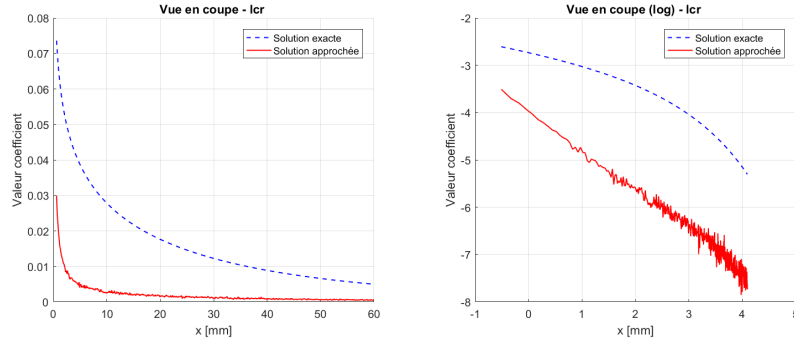


FIGURE 28 – Évolution de la densité de photon en fonction de la distance à la source pour le LCR, avec $C = 2000$

Les courbes confirment la différence significative des résultats. Comme pour le crâne, nous pourrions changer le coefficient de calibrage C pour réduire la différence, cependant nous voyons que les comportements des deux courbes sont eux aussi très différents. Ce n'est donc pas simplement un problème de coefficient, c'est un problème lié à la méthode. Nous avons déjà constaté dans la partie (5.2) que la méthode ne semblait plus fiable pour des valeurs de μ_s trop faibles.

9 Prolongement en multi-couches

Le but de nos simulations est de pouvoir obtenir simplement des solutions pour des milieux complexes. Maintenant que nous avons tout mis en place et visualisé le comportement de chaque milieu, nous voulons donc étudier le comportement de la méthode avec des combinaisons de différents milieux.

9.1 Comportement avec un obstacle

Pour commencer, nous proposons une expérience afin de valider, par le bon-sens, la méthode. Nous nous plaçons dans un domaine comportant 2 zones aux caractéristiques bien distinctes, nous prendrons par exemple le crâne et le LCR. La première zone (LCR) est située dans un carré centré dans le domaine avec la seconde zone (skull) qui l'entoure. Nous plaçons alors la source près du bord, en $(0, 60 - \frac{1}{\mu_s(1-g)})$.

Pour simuler cet obstacle, il nous suffit de changer les valeurs de μ_a et μ_s en fonction de la position du photon, c'est-à-dire utiliser les paramètres de la zone intérieure si le photon est dans celle-ci, ou les paramètres de la zone extérieure sinon. En théorie nous devrions prendre en compte les perturbations créées par l'interface entre deux zones, cependant, l'indice de réfraction pour tous les milieux que nous utilisons est à peu près le même. Nous le supposons alors strictement identique, ainsi il n'y a aucune perturbation à prendre en compte au niveau des interfaces.

Une fois les indicatrices avec les coefficients des milieux correspondants créés, nous effectuons les simulations pour les coefficients de Wallois avec $N = 10^6$ photons, $g = 0.9$ et un angle initial fixé à $\theta = \frac{3\pi}{2}$:

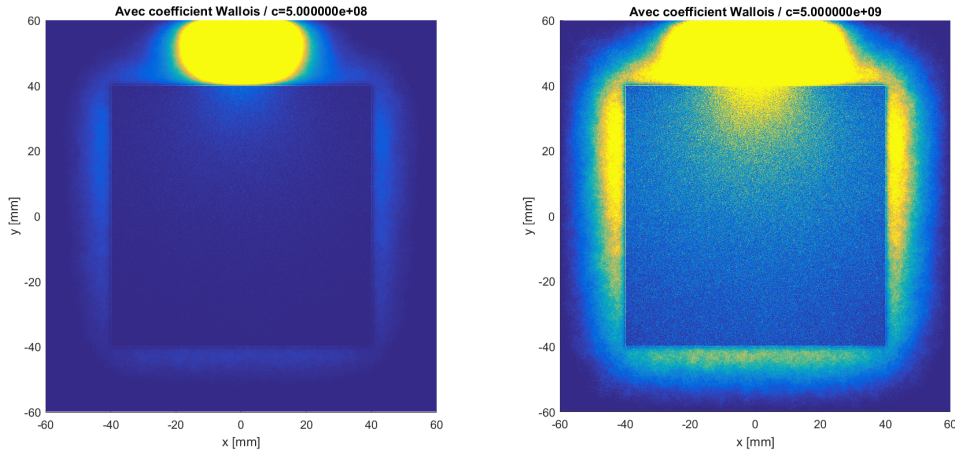


FIGURE 29 – Simulation avec deux zones

Nous observons clairement le carré constitué de LCR au milieu du domaine. En effet, les photons qui entrent dans la zone intérieure ne sont quasiment

pas absorbés et sortent rapidement du carré. En sortant du carré ils sont en revanche rapidement absorbés par la zone extérieure. Ce qui explique pourquoi nous voyons aussi distinctement le carré.

Nous effectuons une simulation en plaçant la source au même endroit que précédemment, mais nous prenons un milieu homogène avec les coefficients du crâne (Wallois). Nous affichons alors sur les mêmes graphiques, chacun des bords des deux simulation :

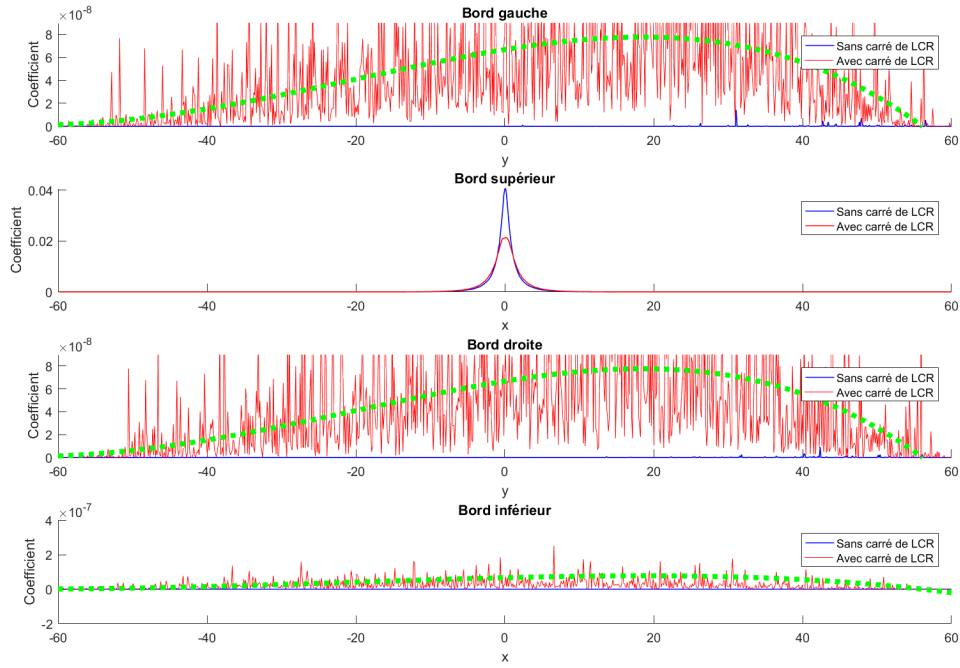


FIGURE 30 – Affichage des bords pour la simulation de l'obstacle

Nous pouvons observer que l'énergie dissipée au niveau des bords est largement supérieure avec le carré de LCR entouré de crâne qu'avec le crâne seul. Excepté pour le bord supérieur qui est lui proche de la source. C'est un résultat logique car le LCR permet aux photons de diffuser rapidement, ils ne leur reste alors que de minces couches de crâne avant de pouvoir atteindre le bord. Or, ces couches de crâne ne suffisent pas pour absorber autant que du crâne seul.

9.2 Simulation avec plusieurs couches

Nous venons de voir que la simulation restait cohérente pour deux zones, nous cherchons à complexifier d'avantage le milieu. Nous voulons alors simuler la propagation de la lumière sur un domaine constitué de couches successives. Ces couches auront approximativement la disposition et les longueurs qu'elles ont en réalité. Nous supposons comme précédemment que l'indice de réfraction est le même pour toutes les couches :

Couche	Scalp	Skull	LCR	MGMB
épaisseur [mm]	2	5	8	—

Comme précédemment, nous construisons des indicatrices qui changent les coefficients μ_a et μ_s en fonction de la position du photon. Nous effectuons la simulation avec $N = 10^7$ photons et $g = 0.9$ pour l'anisotropie. Nous obtenons alors :

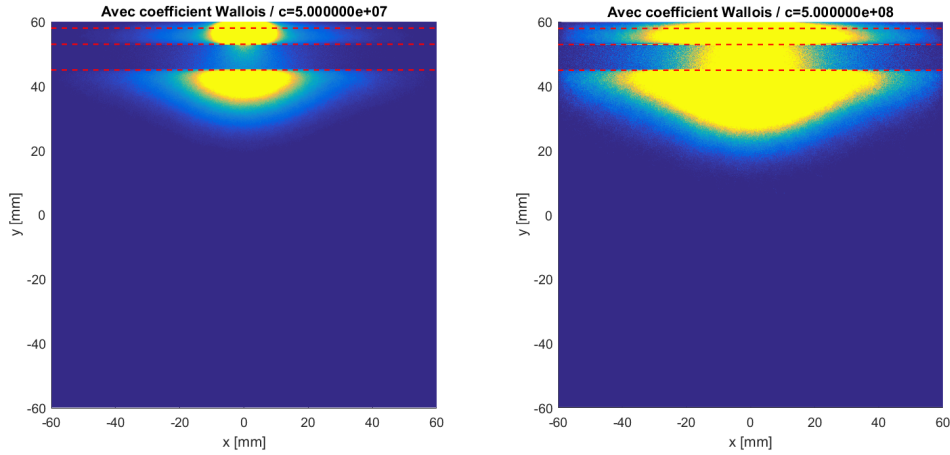


FIGURE 31 – Simulation avec quatre couches

Ces représentations semblent assez satisfaisantes, en effet nous distinguons les 4 couches que nous souhaitons simuler.

Nous proposons d'afficher les bords correspondant au deux affichages précédents afin de voir si nous pouvons distinguer les différentes couches.

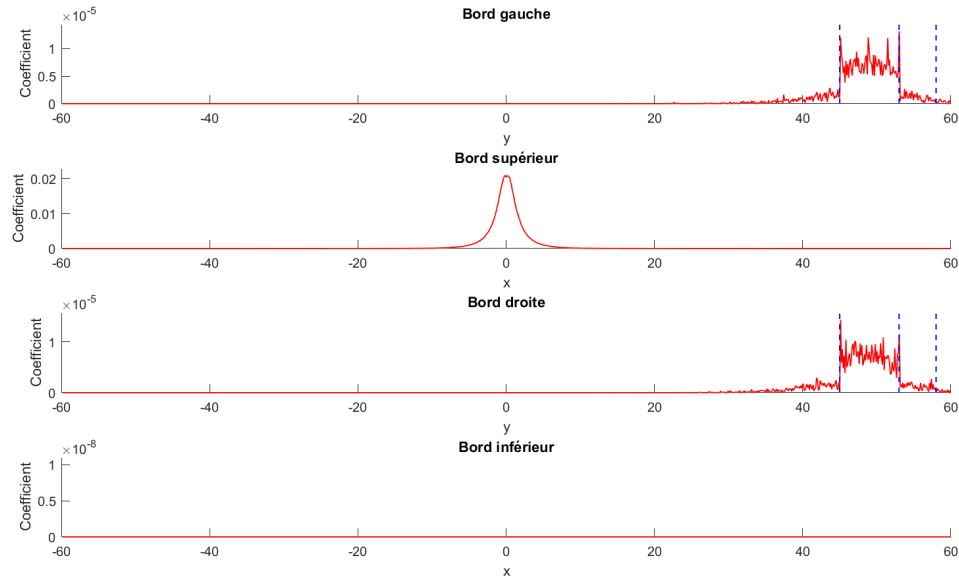


FIGURE 32 – Affichage des bords pour la simulation multi-couche

En effet, nous pouvons clairement voir les interfaces entre chaque couche. De plus nous pouvons remarquer que le LCR présente un effet tunnel, car la majorité de l'énergie dissipée par les bords l'est au niveau de la couche de LCR.

Troisième partie

Conclusion

Durant ce projet, nous avons cherché à comprendre le fonctionnement de la simulation de la lumière par la méthode de Monte-Carlo. Cette approche reste qualitative, car nous nous sommes limités sur plusieurs points, comme par exemple la forme carré du domaine ou encore l'indice de réfraction constant. Notre but était de comprendre le rôle de chaque paramètres.

Le second objectif de ce projet était aussi de comparer la solution obtenue par simulation avec la solution analytique issue de l'équation de Helmholtz. Nous avons ainsi vu que la simulation par Monte-Carlo était un modèle plutôt correct, mais qu'elle présente des problèmes, notamment dans le LCR.

Pour simplifier les représentations et donc la compréhension, nous nous sommes restreint à des simulations en 2 dimensions. Il nous faut alors remarquer que la méthode est complètement adaptable en 3 dimensions et qu'il existe d'ailleurs des logiciels, utilisés en milieu médical, qui permettent d'effectuer ces simulations.

En conclusion, nous avons développé une version simplifiée de la méthode, qui nous a permis de comprendre ses bases. Cependant, de nombreux aspects ne sont pas abordés ici, car ils nécessiteraient des versions beaucoup plus poussées afin de pouvoir les étudier.

Références

- [Montcel] Bruon Montcel, «Tomographie optique diffuse résolue en temps : Applications fonctionnelles en neurosciences», Thèse de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg I, 2005.
- [Wallois] M. Dehaes, K. Kazemi, M. Péligrini-Issac, R. Grebe, H. Benali, F. Wallois, «Quantitative Effect of the Neonatal Fontanel on Synthetic Near Infrared Spectroscopy Measurements», Human Brain Mappin, 34, pp. 878–889, 2013.
- [1] S.L. Jacques, L. Wang, «Monte Carlo Modeling of Light Transport in Tissue», Optical-Thermal response of Laser-Irradiated Tissue, A.J. Welch, M.J.C. Van Gemert, Chapitre 5, 2009.
- [2] S.L. Jacques, L. Wang, «Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered Tissues in Standard C», University of Texas M. D. Anderson Cancer Center, 1992
- [Boas] D.A. Boas, J.P. Culver, J.J. Stott, A.K. Dunn, «Three dimensional Monte Carlo code for photon migration through complex heterogeneous media including the adult human head», NMR Center, Massachusetts General Hospital, Harvard Medical School, Charlestown, Optical Society of America, 2002.
- [3] A. Laughney «A Monte Carlo model of light propagation in tissue», 2009
- [4] C. Bouchon, N. Abboub, J. Gervain, «Near Infrared Spectroscopy : Principes généraux de cette nouvelle technologie de neuroimagerie et contribution à la recherche aux origines du langage», Les Cahiers de l'Audition N ° 3, 2013.
- [5] https://fr.wikipedia.org/wiki/Loi_de_Beer-Lambert
- [6] https://en.wikipedia.org/wiki/Helmholtz_equation
- [7] https://fr.wikipedia.org/wiki/Coefficient_de_Fresnel
- [8] https://fr.wikipedia.org/wiki/Fonction_de_Hankel