

Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives

Mathieu Galtier

► To cite this version:

Mathieu Galtier. Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives. Génie des procédés. Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, 2014. Français. <NNT : 2014EMAC0017>. <tel-01165256>

HAL Id: tel-01165256

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01165256>

Submitted on 18 Jun 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

l'École Nationale Supérieure des Mines d'Albi-Carmaux conjointement avec l'INP Toulouse

Présentée et soutenue le *vendredi 05 décembre 2014* par :

MATHIEU GALTIER

**Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux
hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul
de grandeurs radiatives**

JURY

PHILIPPE DUBUISSON	<i>Professeur des Universités, Université de Lille</i>	Rapporteur
JEAN-LOUIS DUFRESNE	<i>Directeur de Recherche CNRS, Université Pierre et Marie Curie</i>	Rapporteur
FRÉDÉRIC ANDRÉ	<i>Chargé de Recherche CNRS, INSA de Lyon</i>	Examineur
RICHARD FOURNIER	<i>Professeur des Universités, Université de Toulouse</i>	Président du jury, Examineur
MOUNA EL HAFI	<i>Maître assistant, École des Mines d'Albi-Carmaux</i>	Directrice
VINCENT EYMET	<i>Ingénieur de Recherche, École des Mines d'Albi-Carmaux</i>	Co-directeur

École doctorale et spécialité :

MEGEP : Énergétique et transferts

Unité de Recherche :

Centre RAPSODEE, CNRS - UMR 5302, École des Mines d'Albi-Carmaux

Directeur(s) de Thèse :

Mouna EL HAFI et Vincent EYMET

Rapporteurs :

Philippe DUBUISSON et Jean-Louis DUFRESNE

**Approche statistique du rayonnement dans les
milieux gazeux hétérogènes :
de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de
grandeurs radiatives**

Mathieu Galtier

Sous la direction de
Mouna El Hafi et Vincent Eymet

Thèse de doctorat soutenue le vendredi 05 décembre 2014

ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DES MINES D'ALBI-CARMAUX

Résumé / Abstract

Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives

Résumé : L'étude du transfert radiatif dans les gaz (atmosphères planétaires, chambres de combustion, *etc.*) se heurte à deux principales difficultés : les hétérogénéités et la dépendance spectrale des propriétés radiatives du milieu d'intérêt. Les travaux présentés dans ce manuscrit proposent, au travers d'une approche statistique du rayonnement, une solution à ces deux limites qui ne nécessite aucune approximation de modèle physique ou numérique. Cette approche conduira au développement d'algorithmes de Monte-Carlo considérés à l'heure actuelle comme méthodes de référence dans la communauté du transfert radiatif. La difficulté liée aux hétérogénéités du milieu participant sera traitée par une technique empruntée à d'autres disciplines de la physique du transport : les algorithmes à collisions nulles. Leur application au rayonnement consiste à ajouter arbitrairement aux événements d'absorption et de diffusion, un troisième type de collision n'ayant aucun effet sur le transport de photons : les collisions nulles. Ainsi, le coefficient d'extinction résultant de ces trois types de collision pourra être assumé comme homogène. Ensuite, il sera montré comment cette même technique lève un second verrou permettant de repenser de façon statistique l'idée de coefficient d'absorption. Cela ouvrira la voie à des algorithmes de Monte-Carlo qui estiment directement une observable radiative à partir de paramètres de transitions répertoriés dans des bases de données spectroscopiques sans avoir à précalculer rigoureusement le coefficient d'absorption.

Mots-clés : Transfert radiatif, Gaz, Méthode de Monte-Carlo, Hétérogénéité, Collision nulle, Raie d'absorption, Approche statistique, Transition moléculaire.

A statistical approach of radiative transfer in heterogeneous and gaseous media: from molecular transitions sampling to the computation of radiative observables

Abstract: Two major challenges are encountered when studying radiative transfer in gases (*e.g.* combustion chambers or planetary atmospheres): heterogeneity and spectral dependence of radiative properties. The work introduced in this manuscript, addresses this problem through a statistical approach of radiation that requires no model or numerical approximation. This approach leads to the development of Monte-Carlo methods, currently considered as reference solutions in the community of radiative transfer. The difficulty related to heterogeneity is handled by a technique borrowed from other fields of transport physics: null-collision algorithms. Their application to radiation consists in adding to the events of absorption and scattering a third arbitrary type of collision that has no effect on the photon transport. Thus, the extinction coefficient resulting from these three types of collisions can be assumed to be homogeneous. Then, it is shown how this very same technique opens the door to rethinking statistically the concept of absorption coefficient. This leads to Monte-Carlo algorithms that directly estimate radiative observables from transition parameters indexed in molecular spectroscopic databases, without the need of rigorously precomputing absorption coefficients.

Keywords: Radiative transfer, Gas, Monte-Carlo method, Heterogeneity, Null-collision, Absorption line, Statistical approach, Molecular transition.

Remerciements

En tout premier lieu, je tiens à remercier messieurs Philippe Dubuisson et Jean-Louis Dufresne d'avoir accepté de rapporter mes travaux de thèse. Je mesure l'effort entrepris pour s'approprier ce sujet où le formalisme mathématique omniprésent peut rebuter. Ce fut un réel plaisir de lire trois années de travail résumées par les mots de personnes étrangères à ces développements. Pour cela, je leur en suis profondément reconnaissant. Au même titre, je remercie vivement Frédéric André de s'être plongé dans ce sujet avec le même engagement que celui d'un rapporteur et également de m'avoir fait confiance en me proposant ma première expérience de jeune docteur.

Puisqu'il s'agit très certainement de la seule partie de ce manuscrit où je peux employer le mot *chance*, proscrit du langage de la physique statistique, je tiens à souligner celle qui fut la mienne de tomber dans cette équipe, à ce moment précis de son histoire scientifique, où d'importants éléments de blocage semblent céder les uns après les autres et où les plus diverses et intéressantes perspectives commencent à se matérialiser. On me décrivait récemment ce groupe de chercheurs comme un *véritable laboratoire* sans frontière géographique, administrative ou disciplinaire, réuni avec cohérence autour de beaux sujets allant des approches statistiques à l'épistémologie ou de la physique hors-équilibre à la musicologie. Je rejoins totalement cette analyse. En particulier, je garderai en mémoire les nombreux et très fructueux séminaires, où se mêlent, autour d'une belle collection de tableaux blancs, intérêt, passion, formulations intégrales, discussions sans fin, épuisement intellectuel et par conséquence un nombre inimaginable de fou-rires et délires (difficiles à partager de retour dans la "vraie vie"). Je tiens donc naturellement à remercier mes encadrants de thèse pour leurs apports respectifs et leur excellente direction : Mouna, Vincent et Richard. Ils savent à quel point je leur en suis reconnaissant. Je pense aussi aux membres des RICoRay : STOPHE, Olivier, mon petit Guitou et plus récemment Julien. Ces séances de travail, pauses cafés et quelques soirées auront réellement égayé ma thèse. Je vous souhaite le meilleur pour la suite. Dans le même esprit, comment pourrais-je oublier notre merveilleuse team ∇^2 , redoutée (au moins une fois) par les meilleures équipes de quizz toulousaines (et accessoirement amatrices de bonnes bières) : Anaïs, Jacques, Clémence, Sébastien, Kâd, Constance, Sylvain, Sara et Alfonso. Et puis tous les autres : Stéphane, Jérémie, Maxime, Benjamin, Christophe, Cyril, Arnaud, Jean-Jacques, Nicolas, Sébastien, François, Lionel, Jean-Luc, Jacques, Alain, David, ... Chacun à sa mesure, par ses compétences,

connaissances et questionnements, a sans nul doute contribué à ces travaux de thèse.

Je pense également avec gratitude et amitié à l'ensemble des personnes que j'ai eu la *chance* de côtoyer pendant ces trois années, voire depuis sept ans pour certains : les copains de galère, Maceram', Victor, Germain, Nelly, Fiona, Alexandra et tous les doctorants et post-docs albigeois, les enseignants-chercheurs de l'École des Mines et les personnels administratif de choc, sans qui, rien ne serait possible (merci à Christelle, Anne-Marie, Valérie et Marie-Christine) et enfin les chercheurs et doctorants rencontrés pendant ces quelques années en France ou à l'étranger (commission de suivi de l'ED MEGeP, GDR ACCORT...).

Enfin, je terminerai par remercier du fond du cœur mes proches : ma famille qui m'a toujours soutenu avec bienveillance vers cette voie étrange qu'est celle de la recherche, mes amis d'hier et d'aujourd'hui (en particulier *les Gros* qui n'ont pas hésité à poser des jours de congés pour venir assister à ma soutenance) et Clarisse pour sa présence inconditionnelle, qui a partagé (ou supporté), pendant trois longues années, mes week-ends d'ermite, mes soirées interminables au tableau ou à l'ordinateur et toutes les joies généralement associées à une thèse.

Une page se tourne, je pense en avoir bien profité, tant scientifiquement qu'humainement. Merci à tous. Sucrettes et bisounours...

Table des matières

Résumé / Abstract	iii
Remerciements	v
Table des matières	vii
Nomenclature	xi
1 Introduction	1
1.1 Étude du transfert radiatif dans les milieux gazeux	2
1.2 Hétérogénéité et dépendance spectrale : les principales difficultés . . .	3
1.3 Structure du manuscrit	6
2 Transfert radiatif dans les gaz	9
Introduction	10
2.1 Introduction au transfert radiatif	10
2.1.1 Nature du rayonnement thermique	10
2.1.2 Descriptions microscopique, mésoscopique et macroscopique .	12
2.1.3 La luminance : descripteur mésoscopique du transfert radiatif	14
2.1.4 Grandeurs intégrées de la luminance	17
2.2 Équation du transfert radiatif en milieu participant	18
2.2.1 Transport de photons sans interaction avec le milieu	19
2.2.2 Interactions rayonnement/matière en milieu participant	21
2.2.3 Formulation locale de l'équation du transfert radiatif	27
2.2.4 Formulation intégrale de l'équation du transfert radiatif	27
2.3 Coefficient d'absorption en milieu gazeux	33
2.3.1 Mécanismes d'absorption et d'émission du rayonnement	33
2.3.2 Raie d'absorption isolée	34
2.3.3 Des transitions énergétiques au spectre d'absorption	40
Résumé du chapitre	46
3 Approche statistique et méthodes de Monte-Carlo	47
Introduction	48
3.1 Rappels statistiques	50

3.1.1	Variables aléatoires et probabilités	50
3.1.2	Espérance, variance, écart-type et moments d'ordre supérieur à deux	52
3.2	Introduction aux méthodes de Monte-Carlo	54
3.2.1	Les méthodes de Monte-Carlo : un outil stochastique de calcul intégral	55
3.2.2	Estimation de l'erreur statistique	59
3.2.3	Les méthodes de Monte-Carlo en pratique	60
3.3	Étude de la luminance dans un milieu purement absorbant	67
3.3.1	Luminance dans un milieu infini, purement absorbant	67
3.3.2	Approche analogue et réciprocity des chemins	69
3.3.3	Prise en compte des frontières du milieu	71
3.3.4	Échantillonnage préférentiel et approche par variance nulle	72
3.4	Étude de la luminance dans un milieu absorbant et diffusant	74
3.4.1	Luminance dans un milieu absorbant, diffusant, infini	74
3.4.2	Traitement déterministe des tests de Bernoulli	79
3.4.3	Calcul de sensibilités paramétriques	82
3.4.4	Luminance dans un milieu purement absorbant, diffusant et entouré de parois réfléchissantes	84
3.5	Étude d'une grandeur intégrée de la luminance	87
	Résumé du chapitre	88
4	Prise en compte de l'hétérogénéité des propriétés radiatives	91
	Introduction	92
4.1	Problèmes liés à l'hétérogénéité des propriétés optiques	93
4.1.1	Incapacité d'échantillonner analytiquement des libres parcours	93
4.1.2	Alternatives couramment proposées	94
4.1.3	Non-linéarité dans l'expression statistique de l'ETR	96
4.2	Les algorithmes à collisions nulles	97
4.2.1	Historique des algorithmes à collisions nulles	97
4.2.2	Principe des algorithmes à collisions nulles	99
4.2.3	Approche statistique des algorithmes à collisions nulles	100
4.2.4	Vers des coefficients de collision nulle négatifs	103
4.3	Mise en application et étude paramétrique	105
4.3.1	Description du cas d'étude	105
4.3.2	Traitement statistique du type de collision	110
4.3.3	Traitement déterministe des événements d'émission	120
4.3.4	Enseignements sur les choix du \hat{k}_η et du type d'algorithme	129
4.4	Validation d'un solveur radiatif par les algorithmes à collisions nulles	129
4.4.1	Description du cas d'étude et de l'exercice de validation	130
4.4.2	Résultats obtenus	133
	Résumé du chapitre	134
5	Intégration spectrale par échantillonnage des transitions	137
	Introduction	138
5.1	Intégration spectrale d'observables radiatives en milieu gazeux	139
5.1.1	Représentations usuelles du coefficient d'absorption	139

5.1.2	Reformulation statistique du coefficient d'absorption	141
5.1.3	Non-linéarité du terme d'extinction	143
5.2	Algorithmes à collisions nulles avec échantillonnage des transitions . .	145
5.2.1	Représentation statistique du coefficient d'absorption dans l'équation du transfert radiatif	145
5.2.2	Perspectives numériques et analytiques offertes par cette approche	151
5.2.3	Gestion des coefficients négatifs de collision nulle	152
5.2.4	Proposition d'améliorations algorithmiques	153
5.3	Mise en pratique dans un benchmark et choix des paramètres libres .	154
5.3.1	Présentation des six configurations d'étude	156
5.3.2	Approche par variance nulle afin d'orienter le choix des proba- bilités	157
5.3.3	Choix des paramètres libres	161
5.3.4	Résultats obtenus pour les cas d'étude considérés	169
5.3.5	Coefficients $h_{n,m,i,\eta}$ négatifs et événements rares	173
	Résumé du chapitre	176
6	Conclusions et perspectives	177
	Annexes	183
A	Sensibilité à un paramètre de la fonction de phase	185
B	Sensibilité à un paramètre de $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$	189
C	Approche par variance nulle pour les choix de paramètres libres . . .	193
D	Article [Galtier <i>et al.</i> , 2013]	201
E	Article [Eymet <i>et al.</i> , 2013]	225
	Bibliographie	249
	Table des figures	264
	Liste des tableaux	265

Nomenclature

Caractères latins

A	Observable quelconque	e	Erreur relative ou écart-type relatif
A_j	Variable aléatoire d'absorption/émission	E	Énergie
E_j	Variable aléatoire d'émission à la paroi	\mathbb{E}	Espérance
\mathcal{A}	Absorptivité d'un milieu participant	f	Distribution
b	Indice de bande étroite	f	Fonction quelconque
\mathcal{B}	Frontière	f_λ	Profil de raie
c	Vitesse de la lumière	f_{NL}	Fonction non-linéaire
c_0	Vitesse de la lumière dans le vide	F	Descripteur macroscopique
C_m	Densité volumique	g	Fonction quelconque
d	Opérateur différentiel	G	Irradiance
div	Opérateur divergence	h	Constante de Planck
D	Demi-côté	$h_{a,\lambda,\eta}$	Coefficient d'absorption d'une raie isolée
\mathcal{D}	Domaine de l'espace des phases	$h_{d,\lambda,\eta}$	Coefficient de collision nulle d'une raie isolée
$\mathcal{D}_{\mathbf{u}}$	Domaine des directions	$\hat{h}_{\lambda,\eta}$	Coefficient d'extinction d'une raie isolée (incluant le coefficient de collision nulle)
$\mathcal{D}_{\mathbf{v}}$	Domaine de l'espace des vitesses	H	Éclairement
$\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$	Domaine de l'espace géométrique	\mathcal{H}	Fonction de Heaviside (ou fonction échelon)
\mathcal{D}_η	Domaine des nombres d'onde	i	Indice de l'échantillon ou de la réalisation indépendante de l'algorithme de Monte-Carlo
\mathcal{D}_λ	Domaine des longueurs d'onde		
\mathcal{D}_ν	Domaine des fréquences		

ι	Indice de la transition moléculaire ou de la raie	P	Puissance
		P	Pression
\mathcal{I}	Variable aléatoire associée aux transitions moléculaires	\mathcal{P}	Terme puits
		\mathcal{P}	Probabilité discrète
j	Indice de collision	\mathcal{P}_a	Probabilité d'absorption ou d'émission par le milieu
k	Coefficient d'extinction		
\hat{k}	Coefficient d'extinction incluant le coefficient de collision nulle	\mathcal{P}_d	Probabilité de diffusion
\tilde{k}	Coefficient d'extinction approché	\mathcal{P}_e	Probabilité d'absorption ou d'émission par la paroi
k_a	Coefficient d'absorption	\mathcal{P}_i	Probabilité associée à une transition moléculaire
k_B	Constante de Boltzmann	\mathcal{P}_m	Probabilité associée à une espèce moléculaire
k_d	Coefficient de diffusion		
k_n	Coefficient de collision nulle	\mathcal{P}_n	Probabilité de collision nulle
l	Libre parcours ou distance	\mathbf{q}_r	Vecteur densité surfacique de flux radiatif
L	Luminance	Q	Énergie
L^{eq}	Luminance d'équilibre (ou de corps noir, ou de Planck)	r	Nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1
\mathcal{L}	Variable aléatoire de libre parcours	r	Fonction de répartition continue
m	Indice de l'espèce moléculaire	R	Rayon
M	Émittance	R	Fonction de répartition discrète
\mathcal{M}	Variable aléatoire associée aux espèces moléculaires	s	Écart-type d'échantillon
		S	Surface
n	Indice de réfraction	S_i	Intensité de raie
\mathbf{n}	Vecteur normal	S_n	Moment d'ordre n
N	Nombre de particules	S_r	Terme source radiatif
N_i	Nombre de transitions moléculaires	S_\perp	Surface normale
N_{mc}	Nombre de réalisations de Monte-Carlo	\mathcal{S}	Terme source
		t	Temps
N_m	Nombre d'espèces moléculaires	t	Temps de calcul
p	Densité de probabilité	$t_{1\%}$	Temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1%
p_H	Densité de probabilité des nombres d'onde	T	Température
$p_{\mathcal{L}}$	Densité de probabilité des libres parcours	\mathcal{T}	Transmissivité
		\mathbf{u}	Vecteur direction

v	Vitesse	x	Variable quelconque
\mathbf{v}	Vecteur vitesse	\mathbf{x}	Vecteur position
V	Variance de population	X	Variable aléatoire quelconque
\mathcal{V}	Volume d'intérêt	\mathbf{X}	Variable aléatoire de position
VOV	Variance de la variance	\mathbf{X}^*	Variable aléatoire de position d'émission
w	Poids de Monte-Carlo	y	Variable discrète quelconque
W	Variable aléatoire poids	X	Variable aléatoire discrète quelconque
x	Abscisse		

Caractères grecs

α	Absorptivité	λ	Longueur d'onde
α	Scalaire	ν	Fréquence
β	Scalaire quelconque	ξ	Critère d'extinction
β	Intervalle spectral	ϖ	Paramètre quelconque
γ	Demi-largeur de raie à mi-hauteur	σ	Section efficace
γ_D	Demi-largeur de raie de Doppler	σ	Écart-type de population
γ_L	Demi-largeur de raie de Lorentz	σ	Constante de Stefan-Boltzmann
δ	Petit intervalle	ς	Abscisse curviligne
δ	Distribution delta-Dirac	ρ	Réflexivité
ϵ	Émissivité	τ	Épaisseur optique
ζ	Seuil de permutation algorithmique	ϕ	Fonction de phase
η	Nombre d'onde	φ	Angle plan
η_0	Nombre d'onde de centre de raie	χ_m	Fraction molaire
H	Variable aléatoire associée aux nombres d'onde	ω_a	Albédo d'absorption
θ	Angle plan	ω_d	Albédo de diffusion simple
		Ω	Angle solide

Indices

a	Relatif à l'absorption	s	Relatif à la diffusion
b	Indice quelconque	e	Relatif à l'émission

ι	Indice de la transition moléculaire ou de la raie	min	Minimal
		u	Supérieur
i_{iso}	Indice isotopique	w	Relatif à une paroi
j	Indice de collision	η	Monochromatique (relatif à un nombre d'onde)
l	Inférieur	ι	Indice de la transition ou raie d'intérêt
m	Indice de l'espèce moléculaire		
max	Maximal		

Exposants

–	Sortant	v	Dans le vide
+	Entrant ou dans le sens positif		

Autres caractères

∂	Dérivée partielle	∇	Gradient
------------	-------------------	----------	----------

Accents

\overline{A}	Moyenne arithmétique	\hat{A}	Champ majorant ou estimateur
\tilde{A}	Estimation ou variante (selon le contexte)		

CHAPITRE 1



Introduction

1.1	Étude du transfert radiatif dans les milieux gazeux . . .	2
1.2	Hétérogénéité et dépendance spectrale : les principales difficultés	3
1.3	Structure du manuscrit	6

1.1 Étude du transfert radiatif dans les milieux gazeux

La découverte en 1802 par W.H. Wollaston [Wollaston, 1802] de bandes sombres dans le spectre solaire - caractéristiques de l'absorption d'une partie du rayonnement provenant du soleil par l'atmosphère terrestre - marque certainement les prémises de l'étude du transfert radiatif dans les milieux gazeux. L'étude, l'analyse et la modélisation des interactions entre rayonnement et gaz vont alors connaître, essentiellement à partir de la seconde moitié du XIX^{ème} siècle, d'importants développements théoriques, expérimentaux et méthodologiques dans des champs applicatifs variés [Hulst, 1980, Siegel *et al.*, 2011]. Historiquement, c'est l'étude de l'atmosphère terrestre qui motive les premiers travaux sur ce sujet [Fraunhofer, 1817, Langley, 1883, Arrhenius, 1896, Rayleigh, 1920]. Avec l'apparition de nouvelles méthodes et de technologies de calcul, l'étude du rayonnement dans l'atmosphère terrestre prendra une nouvelle dimension avec le développement de la climatologie, de la météorologie moderne ou encore de la paléoclimatologie [Kondratyev, 1969, Goody *et al.*, 1989]. C'est essentiellement au sein de la communauté astrophysique que la théorie se développe ensuite, durant la première moitié du XX^{ème} siècle, avec l'étude de la propagation du rayonnement dans les atmosphères planétaires, dans les étoiles et dans les nuages de gaz interstellaires [Chandrasekhar, 1960, Chandrasekhar, 1963]. Par la suite, grâce à l'étude de fours verriers [Gardon, 1958, Robert, 1958], la prise en compte du rayonnement thermique prendra son essor dans un grand nombre d'applications industrielles où de fortes températures sont rencontrées : fours, moteurs à combustion, chambres de combustion, turboréacteurs, propulsion d'engins spatiaux, centrales solaires thermodynamiques, *etc.* [Viskanta et Mengüç, 1987, Siegel *et al.*, 2011, Modest, 2013].

Malgré les importantes avancées réalisées depuis la fin du XIX^{ème} siècle et le développement récent de puissantes technologies de calcul, l'étude du rayonnement dans les milieux gazeux demeure encore aujourd'hui complexe à prendre en compte. Les besoins ayant évolué dans chaque domaine d'application, les spécialistes sont à la recherche de solutions toujours plus précises et de méthodes de calcul toujours plus efficaces. Parmi les problématiques et enjeux actuels pour lesquels une modélisation rigoureuse du transfert radiatif est essentielle, nous pouvons citer :

- **la simulation climatique et l'élaboration de scénarios.** Le contexte actuel de réchauffement global pousse les climatologues à proposer des modèles et des scénarios climatiques pour tenter de quantifier les effets de l'activité humaine sur le climat. Tous les échanges d'énergie entre le système Terre/atmosphère et le reste de l'univers s'effectuant sous forme de rayonnement, il est crucial de modéliser avec précision ces interactions. Toutefois, les simulations complexes du climat (basées sur des modèles de circulation générale), couplant dynamique des fluides et transferts thermiques, sont souvent très coûteuses. Aussi, un compromis entre précision et temps de calcul est en permanence recherché dans ce champ applicatif.
- **les prévisions météorologiques.** Les besoins croissants en termes de pré-

visions météorologiques orientent la communauté spécialisée à produire des modèles de plus en plus finement résolus (tant spatialement que temporellement), mais également de plus en plus fiables à long terme. Il est alors nécessaire de recourir à des modèles de plus en plus détaillés et des méthodes de calcul de plus en plus précises, tout en respectant les contraintes de temps de calcul qu'imposent en particulier les prévisions à court terme.

- **l'analyse des atmosphères extraterrestres.** Le rayonnement des gaz étant fortement dépendant de leurs propriétés radiatives, les astrophysiciens cherchent, à partir d'observations spectrales, à identifier les propriétés (champs de température, de pression) et les compositions moléculaires des atmosphères stellaires ou exoplanétaires. Mais ces calculs, basés en partie sur des approches inverses, requièrent d'être capable d'estimer avec précision les observables radiatives d'intérêt. Ces axes de recherche sont de plus en plus motivés par des problématiques d'exobiologie ou d'habitabilité exoplanétaire.
- **la simulation du vieillissement de composants exposés à de hautes températures.** Dans des contextes industriels, en particulier chez les motoristes, il est nécessaire de pouvoir garantir la durée de vie des composants soumis à de hautes températures et à d'importantes contraintes thermomécaniques. Pour ce faire, de longues périodes d'essais expérimentaux (pouvant durer plusieurs années) sont généralement réalisées avant la mise en production d'un nouvel élément. Ces industriels sont ainsi très demandeurs d'outils permettant de simuler avec précision la thermique des parois (et en particulier le transfert radiatif) afin d'écourter, en toute confiance, ces coûteuses phases de tests.
- **la simulation des phénomènes de combustion.** La conjoncture environnementale actuelle encourage également les industriels à produire des systèmes de plus en plus économes énergétiquement et de plus en plus propres en termes de rejets. Lors de la conception de chambres de combustion, la prédiction des concentrations de substances dangereuses ou polluantes (NO_x, suies, CO, etc.) fortement dépendantes de la température et l'efficacité de la combustion représentent deux enjeux importants. Les simulations numériques couplant cinétique chimique, dynamique des fluides et transferts thermiques demandent également, dans ces situations, d'être particulièrement précises.

1.2 Hétérogénéité et dépendance spectrale : les principales difficultés

Dans leur ouvrage [Siegel *et al.*, 2011], considéré à l'heure actuelle comme texte de référence en transfert radiatif, les auteurs introduisent l'étude du rayonnement en milieu participant par :

"Two major difficulties make the study of radiation transfer in absorbing, emitting and scattering media quite challenging. The first difficulty is the spatial variation in radiative properties throughout the medium [...]. A second difficulty is that spectral effects are often much more pronounced

in gases [...] than for solid surfaces, and a detailed spectrally dependent analysis may be required."

Si la dépendance spatiale et spectrale des propriétés radiatives du milieu pose un problème majeur, quel que soit l'objet d'étude, c'est que pour décrire localement une observable radiative intégrée spectralement (*ex* : luminance ou bilan radiatif), il est nécessaire de connaître, pour tout point du milieu et pour toute longueur d'onde, ces propriétés radiatives. Or ces dernières, en particulier le coefficient d'absorption, sont à la fois très dépendantes de la pression, de la température et des concentrations des espèces moléculaires présentes, mais aussi, et de façon encore plus prononcée, de la longueur d'onde d'intérêt. Les milieux considérés (flammes, gaz chauds, atmosphères, *etc.*) étant de façon générale fortement hétérogènes et les coefficients d'absorption étant extrêmement variables d'une longueur d'onde à l'autre, il devient vite délicat de réaliser une description rigoureuse de la grandeur radiative observée.

Face à cette importante complexité, les spécialistes du transfert radiatif développent depuis plusieurs décennies des méthodes et modèles approchés, de plus en plus précis et efficaces. Ces derniers ont souvent pour vocation d'être implémentés et couplés avec d'autres phénomènes (mécanique des fluides, cinétique chimique, thermique, *etc.*) dans divers codes de calcul. Ces méthodes et modèles simplifiés sont usuellement validés par des solutions dites de référence, généralement trop coûteuses en termes de temps de calcul pour être compétitives en situation opérationnelle. Les modèles sur lesquels s'appuient ces solutions de référence sont généralement basés sur des descriptions quasi-déterministes (*ex* : approche raie-par-raie pour l'intégration spectrale, ou calcul d'épaisseurs optiques par une discrétisation spatiale des propriétés radiatives pour gérer les non-uniformités du milieu).

Les travaux présentés dans ce manuscrit proposent de répondre, par une approche purement statistique, sans modèle quasi-déterministe sous-jacent, aux deux principales difficultés que représentent la non-uniformité et la dépendance spectrale des propriétés radiatives des milieux gazeux.

Si une approche purement statistique est proposée, c'est parce que face à une telle complexité, ce type d'approche et les méthodes stochastiques qui en découlent (algorithmes de Monte-Carlo) ont, à de nombreuses reprises par le passé, permis de lever diverses limitations, d'offrir certains avantages et d'ouvrir de nouvelles perspectives. Parmi quelques récents travaux, nous pouvons citer ceux de J. Dauchet et d'O. Farges qui ont permis, par une approche statistique, de proposer d'intéressantes solutions originales. Dans [Dauchet, 2012], les approches statistiques ont permis le développement d'algorithmes de Monte-Carlo simulant les propriétés électromagnétiques de micro-organismes en géométrie tridimensionnelle ou encore de quantifier sans aucun biais statistique la production globale d'un photobioréacteur à partir d'une modélisation mésoscopique du transfert radiatif. Ces approches statistiques ont également conduit au développement, dans [Farges, 2014], d'un outil permettant d'optimiser l'agencement d'une centrale solaire thermodynamique par un calcul non biaisé de sa production énergétique sur toute sa durée de fonctionnement. Ces quelques résultats, difficilement imaginables auparavant, témoignent de l'intérêt

réel de reposer un problème sous un angle purement statistique.

De façon plus générale, les approches statistiques et les méthodes de Monte-Carlo qui en découlent sont reconnues pour offrir plusieurs avantages, dont les principaux sont mentionnés ci-après.

- Les approches statistiques sont par nature moins sensibles à la complexité qu’une méthode déterministe. La prise en compte de nouvelles dimensions (passage de deux à trois dimensions, intégration temporelle, volumique, *etc.*) n’a qu’un effet modéré sur le volume de calculs nécessaire à obtenir une précision donnée. De plus, associées à des codes de synthèse d’images [Pharr et Humphreys, 2010, Starwest, 2014a], ces méthodes permettent d’effectuer du suivi de trajectoires dans les géométries les plus compliquées sans voir apparaître de difficulté majeure.
- Les méthodes de Monte-Carlo constituent des solutions de référence dans la mesure où les estimations des grandeurs d’intérêt sont non-biaisées et qu’il est en permanence possible d’estimer (et de réduire autant que nécessaire) l’erreur numérique associée à ces estimations. Elles sont alors fréquemment utilisées pour valider des méthodes ou modèles simplifiés.
- Ces approches statistiques offrent également d’importantes perspectives en termes d’analyse. Il est généralement possible de tirer une analogie directe entre méthode numérique et modèle physique. Ce parallèle permet, par un va-et-vient souvent fructueux, d’optimiser les méthodes et/ou de développer un nouvel intuitif et de nouvelles images physiques conduisant à une meilleure compréhension du modèle physique. De plus, elles permettent entre-autres, d’estimer de façon simultanée au cours du même calcul, une grandeur et des sensibilités de cette grandeur à différents paramètres, sans augmenter de façon significative les temps de calcul associés.
- L’implémentation et la mise en œuvre de ces méthodes sont généralement aisées. Les méthodes de Monte-Carlo sont habituellement très simples d’un point de vue algorithmique. En outre, puisqu’elles reposent sur la répétition d’un grand nombre de réalisations indépendantes, il est très simple de paralléliser ces calculs.

Le positionnement de cette thèse est donc le suivant. Il ne s’agit pas de rechercher une alternative plus rapide ou plus performante que les méthodes et modèles simplifiés utilisés dans les champs applicatifs introduits à la [Sec. 1.1](#), ni même de proposer des algorithmes directement implémentables dans des codes de CFD. Il s’agit d’étudier les apports qu’engendrerait une approche purement statistique du transfert radiatif en milieu gazeux, vis-à-vis de la forte complexité liée aux dépendances spatiales et spectrales des propriétés radiatives. L’intérêt est alors de proposer des approches, un modèle et un formalisme statistique répondant à cette double complexité, de tester la mise en application de ces approches par le développement de méthodes de Monte-Carlo et d’éviter tout compromis sur le modèle pour conserver l’ensemble des avantages communément associés à ces approches, en particulier leur caractère de solution de référence.

Néanmoins, bien que les travaux présentés dans ce manuscrit soient essentiellement théoriques et exploratoires, les contextes applicatifs introduits à la [Sec. 1.1](#) et leurs problématiques associées ont occupé une dimension importante dans l'orientation et la réalisation de cette thèse. Le choix a été fait, pour illustrer, valider, et tester la faisabilité de l'approche proposée de se concentrer sur des applications de type "chambres de combustion". Toutefois, peu de choses séparent ces différents domaines applicatifs pour les problématiques auxquelles tente de répondre cette thèse : la complexité des hétérogénéités et de la dépendance spectrale posent le même type de difficultés quels que soient les champs d'étude.

Le choix de privilégier ces applications de combustion est motivé par plusieurs raisons. La première est que ces systèmes impliquent de petites dimensions et des épaisseurs optiques généralement faibles qui sont plus aisées à gérer dans une démarche exploratoire. Les applications de type combustion présentent également une seconde caractéristique : les températures élevées. Or, c'est à haute température que les propriétés radiatives sont les plus dépendantes de la longueur d'onde. La complexité liée à cette dépendance sera donc accentuée, et nous permettra de valider la robustesse des propositions faites ici. Enfin, dans les applications de combustion, on peut se passer de prendre en compte les continuums d'absorption induite par collision, la nature sub-lorentzienne des profils de raie ou encore les problématiques d'hors-équilibre thermodynamique local, ce qui n'est généralement pas le cas dans l'étude des atmosphères. La prise en compte de ces effets, nécessaire dans un grand nombre d'applications, ne présente pas dans la démarche qui est la nôtre d'intérêt immédiat, puisqu'ils ne sont pas directement liés aux hétérogénéités ou à la dépendance spectrale des propriétés radiatives. Toutefois, même si ce manuscrit ne traite, à proprement parler, d'aucun cas atmosphérique ou astrophysique, les problématiques associées à ces deux domaines ont constamment conditionné notre réflexion. C'est d'ailleurs vers ces champs applicatifs que l'on souhaite aujourd'hui se tourner.

1.3 Structure du manuscrit

Les travaux, dont ce manuscrit rend compte, ont été effectués au sein de l'équipe "Transfert radiatif - Solaire à concentration" du laboratoire RAPSODEE ¹ sous la direction de M. El Hafi et de V. Eymet. Cette thèse s'inscrit, plus généralement dans une dynamique collective, initiée depuis plusieurs années par le groupe STARWest ² [[Starwest, 2014a](#)] qui réunit des membres, issus de domaines applicatifs variés, autour de problématiques liées à la physique du transport, à la modélisation statistique de systèmes complexes et à la production de solutions de référence. Les interactions avec ces spécialistes d'horizons variés ont été d'un intérêt majeur pour la réalisation de ces travaux et ont permis de les intégrer dans des considérations beaucoup plus transversales et riches en sens. Nous espérons que ce manuscrit reflétera les échanges

1. Centre de Recherche d'Albi en génie des Procédés, des Solides Divisés, de l'Énergie et de l'Environnement - École Nationale Supérieure des Mines d'Albi-Carmaux

2. Groupement transdisciplinaire structuré autour de plusieurs équipes de recherche issues de différents laboratoires : LAPLACE (Toulouse), RAPSODEE (Mines Albi), PROMES (Odeillo), CRCA (Toulouse), Institut Pascal (Clermont-Ferrand).

prolifiques qui ont eu lieu au cours ces trois années. Cette thèse donne suite au stage de fin d'études de G. Terrée [Terrée, 2011] et aux travaux exploratoires menés par B. Piaud [Piaud, 2010].

Lors de la rédaction de ce manuscrit, une attention particulière a été portée à sa dimension didactique. En effet, notre pratique des approches statistiques et intégrales, se traduit souvent par un formalisme mathématique peu attrayant. Mais celui-ci offre, comme nous allons le voir, un intérêt certain. Aussi, nous avons essayé tout au long de ce document de présenter les travaux et l'approche qui est la nôtre, de la façon la plus progressive et cohérente possible. Ce manuscrit a été rédigé dans l'optique de servir de base à toute personne qui souhaiterait reprendre et/ou poursuivre le travail entrepris.

Ce dernier est structuré autour de six chapitres dont le premier constitue la présente introduction.

Dans le **Chap. 2** sont rappelées les bases de la physique du rayonnement en milieu gazeux. Les différentes interactions rayonnement/gaz y sont présentées et le rayonnement y est placé dans sa description mésoscopique, permettant ainsi de formuler les équations locales et intégrales du transfert radiatif. Une importante partie de ce chapitre est également consacrée à la description du coefficient d'absorption, qui représente probablement une des principales difficultés (de par ses multiples dépendances spectrales, thermodynamiques et chimiques) rencontrées lors de la simulation du transfert radiatif dans les milieux gazeux.

Le **Chap. 3** aborde, quant à lui, l'approche intégrale et statistique du rayonnement dans les gaz et présentera les méthodes de Monte-Carlo qui en découlent. Après de brefs rappels statistiques, un cas d'étude radiatif simple sera proposé et sera complexifié progressivement, de sorte à introduire le formalisme ainsi que toutes les pratiques, techniques et approches qui seront utilisées dans la suite du manuscrit. L'importance des formulations intégrales et statistiques du transport de photons, lors du développement de méthodes de Monte-Carlo, y sera également soulignée. Ce chapitre a pour but de détailler tous ces aspects techniques et formels afin de rendre la lecture des travaux présentés dans les parties suivantes plus aisée et fluide.

Puis, le **Chap. 4** abordera, à proprement parler, les premiers travaux de ces trois années de thèse relatifs à la gestion des hétérogénéités des propriétés radiatives du milieu. Les difficultés associées à la gestion de ces hétérogénéités par les méthodes de Monte-Carlo, ainsi que les techniques couramment utilisées (en particulier la discrétisation volumique) pour y répondre, seront présentées dans un premier temps. Puis nous montrerons l'intérêt qu'offre une approche utilisée depuis plusieurs décennies dans d'autres disciplines ayant trait au transport corpusculaire : les *algorithmes à collisions nulles*. Cette technique sera alors introduite et élargie au champ d'étude du rayonnement thermique. Nous montrerons comment elle permet de passer outre la non-linéarité qu'induit la représentation statistique du terme d'extinction par l'ajout d'un troisième type de collisions (arbitraires et sans effet sur

le transport de photons). Une étude paramétrique étudiant les conséquences des choix de paramètres libres sera ensuite réalisée dans un cas assez général et nous montrerons comment le caractère de solution de référence des algorithmes à collisions nulles peut être mis à profit dans la validation d'un code de calcul radiatif en géométrie complexe.

Ensuite, dans le **Chap. 5**, nous verrons que ces mêmes algorithmes à collisions nulles nous permettent de lever un second verrou relatif à l'intégration spectrale. Il sera alors possible, grâce à cette introduction de collisions fictives, de décrire de façon purement statistique le coefficient d'absorption au sein même de l'équation du transfert radiatif. Cela conduira au développement de méthodes de Monte-Carlo permettant d'estimer une observable radiative sans aucun biais et sans nécessiter la production rigoureuse et préalable de spectres d'absorption haute-résolution. Le calcul de grandeurs radiatives reposera alors sur un échantillonnage des transitions moléculaires dont les paramètres seront extraits au cours du calcul directement depuis des bases de données spectroscopiques. Cette proposition repose toutefois sur un grand nombre de paramètres libres (en particulier les probabilités associées aux raies d'absorption) qui conditionnent le taux de convergence de l'algorithme. Aussi, nous proposerons des choix pour ces grandeurs arbitraires et étudierons, par une mise en application dans six cas d'étude caractéristiques de systèmes de combustion, le comportement algorithmique et les perspectives qu'offre l'approche proposée associée à ces choix de paramètres libres.

Enfin, le **Chap. 6** conclura l'exposé de ces travaux de thèse et exposera les perspectives et les pistes de travail qu'offrent les propositions faites dans ce manuscrit.

CHAPITRE 2

Transfert radiatif dans les gaz

Introduction	10
2.1 Introduction au transfert radiatif	10
2.1.1 Nature du rayonnement thermique	10
2.1.2 Descriptions microscopique, mésoscopique et macroscopique	12
2.1.3 La luminance : descripteur mésoscopique du transfert radiatif	14
2.1.4 Grandeurs intégrées de la luminance	17
2.2 Équation du transfert radiatif en milieu participant . . .	18
2.2.1 Transport de photons sans interaction avec le milieu . . .	19
2.2.2 Interactions rayonnement/matière en milieu participant .	21
2.2.3 Formulation locale de l'équation du transfert radiatif . . .	27
2.2.4 Formulation intégrale de l'équation du transfert radiatif .	27
2.3 Coefficient d'absorption en milieu gazeux	33
2.3.1 Mécanismes d'absorption et d'émission du rayonnement .	33
2.3.2 Raie d'absorption isolée	34
2.3.3 Des transitions énergétiques au spectre d'absorption . . .	40
Résumé du chapitre	46

Introduction

Ce premier chapitre a pour but de présenter les éléments de physique nécessaires à l'étude du transfert radiatif en milieu gazeux. Il n'a pas pour prétention d'être exhaustif, mais a été pensé de sorte à introduire l'ensemble des concepts et modèles utilisés dans la suite de ce manuscrit. Le lecteur à l'aise avec ces concepts pourra passer directement au [Chap. 3](#). Au contraire, le lecteur désireux d'approfondir ses connaissances relatives à la physique du rayonnement pourra s'orienter vers les ouvrages de référence [[Chandrasekhar, 1960](#), [Goody et Yung, 1996](#), [Siegel et al., 2011](#), [Modest, 2013](#)].

Après un bref rappel de la nature et des représentations du rayonnement thermique, ce dernier sera introduit dans sa description mésoscopique. La luminance, grandeur de base et descripteur mésoscopique du transfert radiatif pourra ainsi être abordée. Enfin, les principales grandeurs intégrées de la luminance seront introduites.

La seconde section, quant à elle, traitera des interactions entre rayonnement et *milieu participant* ou *semi-transparent*. Cela permettra de formuler l'Équation différentielle du Transfert Radiatif (ETR), cas particulier des équations de transport (plus connues sous le terme d'équations de Boltzmann). La solution intégrale de l'équation du transfert radiatif sera enfin abordée, permettant ainsi de présenter les conditions et phénomènes se produisant aux limites du système d'intérêt.

Enfin, l'ultime section de ce chapitre concernera la dépendance spectrale du coefficient d'absorption, constituant probablement la principale difficulté de l'étude du rayonnement dans les gaz. Ce sera l'occasion d'aborder les mécanismes sous-jacents d'absorption et d'émission, les notions de transitions énergétiques, de raies et de spectres d'absorption.

Outre les quelques ouvrages cités ci-dessus, la rédaction de ce chapitre est en partie inspirée des cours dispensés en Master 2 Recherche "Dynamique des Fluides, Énergétique et Transferts" [[Fournier et El Hafi, 2010](#)] et à l'École thématique "Rayonnement thermique en milieu semi-transparent - 2014" [[Blanco et al., 2014](#), [André et al., 2014](#), [Boulet et al., 2014](#)].

2.1 Introduction au transfert radiatif

2.1.1 Nature du rayonnement thermique

Deux représentations coexistent lorsqu'il s'agit de décrire le transfert radiatif : les approches dites *ondulatoire* et *corpusculaire*¹.

L'approche ondulatoire repose sur la théorie électromagnétique développée à la fin du XIX^{ème} siècle par J.K. Maxwell. Le rayonnement est alors considéré comme une variation des champs électromagnétiques et est représenté comme un ensemble d'ondes monochromatiques définies pour une fréquence ν , une longueur d'onde λ ou

1. Cette dualité onde-corpuscule a été étendue à l'ensemble de la matière par L. de Broglie en 1924.

un nombre d'onde η donné. Ces différentes grandeurs sont liées par les relations :

$$\lambda = \frac{1}{\eta} = \frac{c}{\nu} \quad ; \quad \eta = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} \quad ; \quad \nu = \frac{c}{\lambda} = c\eta$$

où c est la vitesse du rayonnement dans le milieu considéré ($c = c_0 = 299\,792\,458\text{ m/s}$ dans le vide et $c = \frac{c_0}{n}$ dans les milieux d'indice de réfraction n). Même si ces trois grandeurs peuvent être utilisées indifféremment, nous nous efforcerons dans ce manuscrit de privilégier la notion de nombre d'onde, qui est historiquement la plus usitée en spectroscopie moléculaire². Au cours des découvertes, ces ondes monochromatiques ont été regroupées selon leur fréquence en plusieurs plages spectrales présentées à la Fig. 2.1.

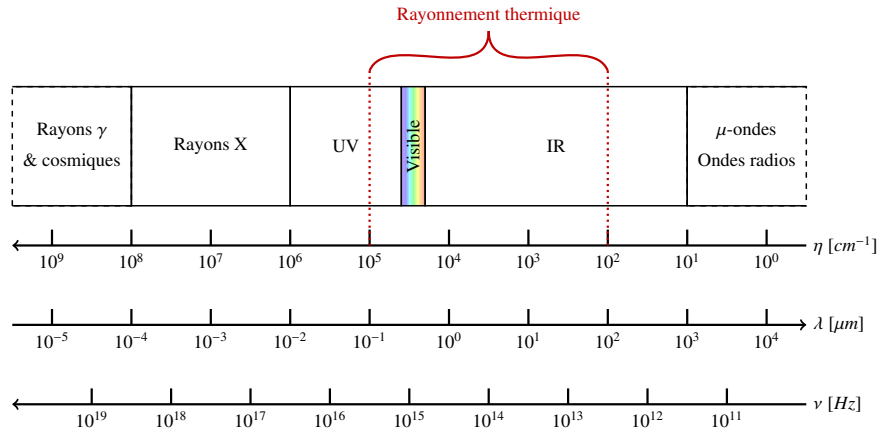


FIGURE 2.1 – Spectre électromagnétique. Les différentes plages spectrales sont schématisées en fonction du nombre d'onde η , de la longueur d'onde λ et de la fréquence ν . Elles s'étendent des rayons cosmiques (les plus énergétiques) aux ondes radioélectriques (les moins énergétiques). Le rayonnement thermique s'étend approximativement sur la plage $[10^2, 10^5]\text{cm}^{-1}$ et comprend une partie des ultraviolets, la totalité du rayonnement visible et le proche et moyen infrarouge.

La seconde approche dite corpusculaire, formalisée par M. Planck et A. Einstein au début du XX^{ème} siècle, est à l'origine des principes de la mécanique quantique. Elle consiste à associer à toute onde électromagnétique monochromatique un corpuscule : le *photon*, de masse nulle et d'énergie E donnée par :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\eta \quad (2.1)$$

où $h = 6.62606957 \times 10^{-34}\text{ J.s}$ est la *constante de Planck*.

Les représentations corpusculaires et ondulatoires sont complémentaires. Aucune d'entre elles ne permet de décrire l'ensemble des phénomènes liés à la physique du rayonnement. Aussi, selon les objets d'étude et les hypothèses posées, l'une ou l'autre sera privilégiée (par exemple, l'approche ondulatoire sera la plus appropriée pour l'étude des phénomènes de diffusion, alors que l'approche corpusculaire permettra

2. Il est fréquent de trouver dans la littérature les nombres d'onde écrits ν .

d'expliquer l'effet photoélectrique). Nous nous concentrerons ici presque essentiellement sur l'approche corpusculaire du rayonnement qui, nous allons le voir, permettra une description mésoscopique et statistique du rayonnement, le plaçant dans des considérations propres à la physique du transport.

Comme illustré dans la [Fig. 2.1](#), le rayonnement électromagnétique s'étend des rayons cosmiques aux ondes radios. Tout au long de ce manuscrit nous ne nous concentrerons que sur le rayonnement thermique couvrant le domaine des nombres d'onde allant approximativement de 10^2 à 10^5 cm^{-1} (une partie des ultraviolets, l'ensemble du visible et le proche et moyen infrarouge). Le rayonnement thermique est, au même titre que la conduction/diffusion, un mode de transfert de chaleur. Il présente cependant deux principales spécificités vis-à-vis de ses homologues :

- de par sa nature électromagnétique, le transfert d'énergie ne nécessite pas de milieu physique pour avoir lieu : deux surfaces placées dans le vide peuvent ainsi échanger de l'énergie.
- alors que les échanges thermiques conductifs/diffusifs sont fonction d'un gradient de température, les échanges par transfert radiatif dépendent d'une différence de températures élevées à la puissance 4, devenant ainsi prépondérants pour de fortes températures. Cela souligne en particulier l'importance de la modélisation du rayonnement dans des applications liées à la combustion.

2.1.2 Descriptions microscopique, mésoscopique et macroscopique

Considérer le rayonnement selon une approche corpusculaire consiste à percevoir ce transfert d'énergie comme ayant pour vecteur un très grand nombre de quanta : *les photons*. Lorsqu'il s'agit d'étudier un si grand nombre de particules, plusieurs descriptions (ou modélisations) sont susceptibles d'être employées : les *descriptions microscopique, macroscopique et mésoscopique* [Piaud, 2007, Lachowicz, 2011, Dauchet, 2012]. Ces trois descriptions se différencient essentiellement par le choix des grandeurs descriptives du modèle. Il s'agit ici bien de descriptions et non d'échelles : passer d'une description microscopique à une description macroscopique ne signifie pas nécessairement considérer le système à une échelle plus globale. Ces trois types de descriptions tirent leur origine de la physique du transport corpusculaire. Aussi, elles seront ici présentées dans leur acception originelle. Leur extension au transfert radiatif sera ensuite discutée.

Description microscopique La description microscopique consiste à associer à chaque corpuscule, de façon déterministe, une position et une vitesse, pour un instant t donné. En considérant un champ de N particules dans une configuration tridimensionnelle, cela impliquerait donc, au moins $6 \times N$ descripteurs (N jeux de deux vecteurs de dimension 3 : un pour la position et un pour la direction ayant tous pour seule variable le temps t). Même si cette description semble idéale, la quantité d'information qu'elle requiert est très difficilement manipulable³ et surtout

3. Afin de donner un ordre de grandeur, une simple surface de 1m^2 portée à 300K peut émettre jusqu'à 4.1×10^{22} photons en une seconde, soit une quantité de 2.5×10^{23} variables décrivant

difficilement conceptualisable, d'autant plus si le transport est non-linéaire (si les particules interagissent entre-elles, *ex* : cinétique des gaz).

Description mésoscopique Alors que la description microscopique repose sur une approche discrète du modèle (chaque molécule est considérée en tant que telle), la description mésoscopique s'appuie sur des concepts de continuité. Le descripteur du système est désormais une fonction de distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ définie sur l'*espace des phases* (constitué de l'espace géométrique $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$ et de l'espace des vitesses $\mathcal{D}_{\mathbf{v}}$). Les positions \mathbf{x} et les vitesses \mathbf{v} deviennent alors, au même titre que le temps t des variables indépendantes. Cette approche est propre à la physique du transport corpusculaire et pose les concepts nécessaires à une approche de type statistique grâce la notion de distribution qui s'interprète comme la somme des densités de probabilité de présence de chaque particule dans l'espace des phases $\{\mathcal{D}_{\mathbf{x}}, \mathcal{D}_{\mathbf{v}}\}$. Elle est pertinente dans les cas où un grand nombre d'événements se répète, soit parce que le nombre de particules considérées est très grand soit parce que les particules subissent de très nombreuses interactions.

Description macroscopique Enfin, la description macroscopique repose également sur l'idée de distribution. Le descripteur $F(\mathbf{x}, t)$ est toujours une fonction de distribution, mais est désormais défini uniquement sur l'espace géométrique $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$. Ce passage se traduit par une intégration sur le domaine des vitesses du descripteur mésoscopique et est souvent associé à une hypothèse d'isotropie. Une telle description se traduit donc par une perte conséquente de l'information relative aux vitesses des particules et devient ainsi plus difficilement applicable à des problèmes hors-équilibre. Toutefois, du fait de l'allègement du nombre de variables indépendantes (seulement \mathbf{x} et t), cette description est peut-être la plus aisée à approcher. De surcroît, les approximations ou hypothèses associées à cette description (*ex* : l'approximation de diffusion) font le plus souvent appel à des images physiques courantes et intuitives (les température, masse volumique ou encore vitesse moyenne d'un fluide sont autant de grandeurs macroscopiques couramment manipulées). Cela explique notamment le fait que cette description et ses grandeurs associées sont souvent privilégiées dans les sciences pour l'ingénieur, du fait de la complexité des phénomènes en présence (en particulier lorsqu'il s'agit de phénomènes couplés). Plusieurs descripteurs macroscopiques du transfert radiatif seront présentés à la [Sec. 2.1.4](#).

L'étude du rayonnement reposera essentiellement ici sur des considérations mésoscopiques. Une telle description présente en effet un double avantage :

- elle permet une description des phénomènes à l'échelle du photon (qui feront l'objet de la [Sec. 2.2.2](#)). En effet, les informations relatives à la position et à la vitesse des particules à un instant donné sont contenues dans l'idée de distribution et il sera possible d'attribuer de façon statistique une vitesse et une position aux différents corpuscules d'intérêt.

le modèle. En imaginant que l'on parvienne idéalement à stocker chacune de ces variables dans un octet, il faudrait un espace disque de 250 milliards de téraoctets pour simplement contenir l'information des photons émis par la surface en une seconde.

- elle offre, par sa nature statistique, la capacité d'analyse des modélisations macroscopiques pour l'étude et la prise en compte de phénomènes collectifs, tout en conservant l'information relative aux distributions de vitesses.

Néanmoins, dès que l'occasion se présentera, nous nous appuierons sur les deux autres descriptions qui permettront d'apporter d'autres images physiques, souvent plus manipulables ou intuitives.

2.1.3 La luminance : descripteur mésoscopique du transfert radiatif

La *luminance monochromatique*⁴ $L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ constitue la grandeur de base du transfert radiatif. D'un point de vue énergétique, il s'agit d'une puissance par unité de surface perpendiculaire à la direction \mathbf{u} considérée, par unité d'angle solide autour de la direction \mathbf{u} (cf. note ci-dessous), et par unité de nombre d'onde (ou de longueur d'onde, ou de fréquence). Elle s'exprime en $Wm^{-2}sr^{-1}cm$.

NOTE : Angle solide

L'angle solide est une généralisation à la troisième dimension de l'angle plan. Alors que l'angle plan (exprimé en radian) est égal au rapport de la longueur d'un arc de cercle sur son rayon, l'angle solide Ω est défini comme le rapport d'une surface partielle de sphère S sur le carré de son rayon R : $\Omega = S/R^2$. Son unité, bien qu'adimensionnelle, est le stéradian noté sr . L'angle solide associé à une sphère est alors égal à 4π et celui associé à un hémisphère à 2π . L'angle solide élémentaire $d\Omega$ (voir Fig. 2.2) correspond à la différentielle de la direction \mathbf{u} qui le porte et est donné par :

$$d\Omega = d\mathbf{u} = \frac{dS}{R^2} = \frac{R^2 d\theta \sin \theta d\phi}{R^2} = d\theta \sin \theta d\phi \quad (2.2)$$

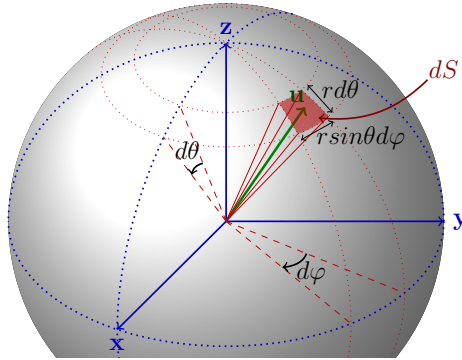


FIGURE 2.2 – L'angle solide élémentaire est donné par $d\Omega = d\theta \sin \theta d\phi$

4. Il est fréquent de rencontrer dans la littérature internationale la luminance notée I_η (pour specific intensity).

La luminance monochromatique est en fait le *descripteur mésoscopique* du transfert radiatif. Elle est assimilable à la distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ à trois subtilités près :

- On peut généralement considérer que la norme de la vitesse des photons est localement constante. Il est donc possible de raisonner en directions $\mathbf{u} \equiv [\theta, \phi]$ plutôt qu'en vitesses $\mathbf{v} \equiv [v_x, v_y, v_z]$, passant donc de l'espace des vitesses $\mathcal{D}_{\mathbf{v}}$ à l'espace des directions $\mathcal{D}_{\mathbf{u}}$.
- À l'espace des positions $\mathcal{D}_{\mathbf{x}}$ et des directions $\mathcal{D}_{\mathbf{u}}$ se rajoute une dimension supplémentaire : celle des nombres d'onde \mathcal{D}_{η} , des longueurs d'onde \mathcal{D}_{λ} ou des fréquences \mathcal{D}_{ν} . On a donc, pour une configuration tridimensionnelle, sept variables (trois pour la position, deux pour la direction, une pour le nombre d'onde et une pour le temps).
- Plus qu'une distribution de particules qui serait alors, aux vues des deux considérations précédentes, définie comme $f_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ ⁵, la notion de luminance inclut l'énergie et la vitesse des photons. Elle est définie comme :

$$L_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = hc\eta c f_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (2.3)$$

Il est important de bien saisir la notion de luminance et donc l'idée de distribution sur l'espace $\mathcal{D} = \{\mathcal{D}_{\mathbf{x}}, \mathcal{D}_{\mathbf{u}}, \mathcal{D}_{\eta}\}$. La distribution $f_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est une extension de la densité à l'espace des phases. Elle correspond à la somme des densités de probabilité de présence de tous les photons en un point $(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \eta, t)$ dans l'espace \mathcal{D} . Une manière assez intuitive d'appréhender le passage de distribution à luminance consiste à considérer un volume $d\mathbf{x}$, un angle solide $d\mathbf{u}$ et un intervalle spectral $d\eta$ élémentaires (en d'autres termes, un sous espace infinitésimal $d\mathcal{D}$ de \mathcal{D}), voir Fig. 2.3. Le nombre

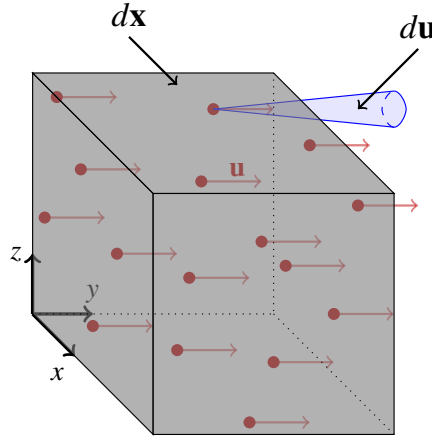


FIGURE 2.3 – La distribution de photons en un point $(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \eta, t)$ de l'espace des phases correspond à la limite du nombre de photons situés à un instant t en $\mathbf{x} \in d\mathbf{x}$, ayant une direction $\mathbf{u} \in d\mathbf{u}$ et un nombre d'onde $\eta \in d\eta$ pour $d\mathbf{x}$, $d\mathbf{u}$ et $d\eta$ tendant vers 0.

de photons $dN_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ à un instant t dans $d\mathbf{x}$, ayant une direction de propagation

5. Par convention le nombre d'onde η (ou longueur d'onde λ ou fréquence ν) est indiqué, dans la mesure où, comme nous allons le voir, aucun opérateur de l'équation du transfert radiatif ne fait appel au nombre d'onde (sous l'hypothèse de diffusion élastique).

comprise dans $d\mathbf{u}$ et un nombre d'onde η compris dans $d\eta$ est alors donnée par la relation

$$dN_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = f_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{u} d\eta \quad (2.4)$$

faisant intervenir la distribution $f_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ (qui s'exprime en $m^{-3}sr^{-1}cm$). C'est probablement le caractère discret du nombre de photons qui rend ce passage le plus délicat et qui ne permet rien d'autre que d'accepter la distribution comme une densité de probabilité de présence des photons. Multiplier cette distribution par l'énergie et la vitesse des photons considérés, équivaut à étudier la puissance $dP_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ associée aux photons de directions comprises dans $d\mathbf{u}$, de nombres d'onde compris dans $d\eta$ passant par un élément de surface dS_\perp normal à \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} dP_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \eta, t) &= f_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) hc\eta c dS_\perp d\mathbf{u} d\eta \\ &= L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) dS_\perp d\mathbf{u} d\eta \end{aligned} \quad (2.5)$$

et permet ainsi de passer à une expression fonction de la luminance (qui est alors bien homogène à des $Wm^{-2}sr^{-1}cm$), voir Fig. 2.4a. En raisonnant en énergie plutôt qu'en puissance, cela revient à observer une quantité d'énergie monochromatique $dQ_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ qui traverse pendant un intervalle de temps dt la surface dS_\perp dans la direction \mathbf{u} et donc considérer l'énergie associée aux photons de directions comprises dans $d\mathbf{u}$, de nombres d'onde compris dans $d\eta$ se propageant dans le volume élémentaire $dS_\perp cdt$ (voir Fig. 2.4b. On a alors :

$$\begin{aligned} dQ_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \eta, t) &= f_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) hc\eta dS_\perp cdt d\mathbf{u} d\eta \\ &= L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) dS_\perp dt d\mathbf{u} d\eta \end{aligned} \quad (2.6)$$

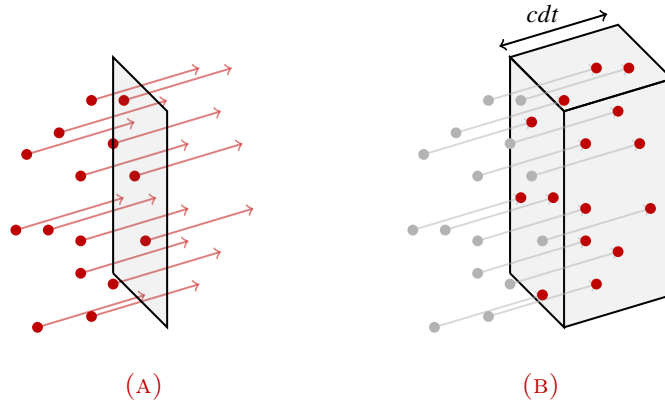


FIGURE 2.4 – La luminance peut être définie comme soit :

- la limite de la puissance associée aux photons passant par $dS_\perp \ni \mathbf{x}$, de direction $\mathbf{u} \in d\mathbf{u}$ et de nombre d'onde $\eta \in d\eta$ pour dS_\perp , $d\mathbf{u}$, $d\eta$ tendant vers zéro (Fig. (A))
- la limite de l'énergie associée aux photons se propageant dans le volume élémentaire $dS_\perp cdt$, de direction $\mathbf{u} \in d\mathbf{u}$ et de nombre d'onde $\eta \in d\eta$ pour dS_\perp , dt , $d\mathbf{u}$, $d\eta$ tendant vers zéro (Fig. (B)).

Jusqu'à présent, seule la *luminance monochromatique* $L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ a été présentée, soulignant le fait que l'espace des nombres d'onde est une dimension à part entière de l'espace sur lequel est défini le descripteur mésoscopique. Cependant, il est

souvent intéressant d'étudier la luminance dite *totale* $L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ c'est-à-dire intégrée spectralement sur un intervalle donné $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$. La luminance totale s'exprime alors en $Wm^{-2}sr^{-1}$ et est donnée par :

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} L_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\eta \quad (2.7)$$

Dans les applications présentées dans ce manuscrit, l'intervalle spectral d'intégration $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$ sera généralement choisi de sorte à couvrir le domaine fréquentiel du rayonnement thermique.

2.1.4 Grandeurs intégrées de la luminance : passage à une description macroscopique

La luminance étant désormais décrite dans son acceptation mésoscopique, il est possible de définir d'autres grandeurs énergétiques, celles-ci macroscopiques. Elles seront ici uniquement exprimées de façon monochromatique. Mais, tout comme pour la luminance, quelle que soit la grandeur considérée, le passage de son expression *monochromatique* A_{η} à son expression dite *totale* A se fera par intégration spectrale sur l'intervalle d'intérêt $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$:

$$A = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} A_{\eta} d\eta \quad (2.8)$$

L'irradiance (ou *rayonnement incident*) est la première grandeur macroscopique, elle correspond au moment d'ordre 0 de la distribution angulaire des luminances. En d'autres termes, elle est définie comme l'intégrale sur l'espace des directions $\mathcal{D}_{\mathbf{u}}$ ($\mathcal{D}_{\mathbf{u}} = 4\pi sr$ pour un milieu participant) de la luminance et s'exprime en $Wm^{-2}cm$.

$$G_{\eta}(\mathbf{x}, t) = \int_{4\pi} L_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u} \quad (2.9)$$

Le vecteur densité surfacique de flux correspond quant à lui au moment d'ordre 1 de la distribution angulaire des luminances. C'est une grandeur vectorielle qui s'exprime également en $W.m^{-2}.cm$ et qui est donnée par :

$$\mathbf{q}_{R,\eta}(\mathbf{x}, t) = \int_{4\pi} L_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u} d\mathbf{u} \quad (2.10)$$

Il est très fréquent de rencontrer ce descripteur en mécanique des fluides et en thermique. Sa seule connaissance au point \mathbf{x} permet de remonter à la densité de flux $\varphi_{\eta}(\mathbf{x}, t)$ relative à n'importe quelle surface contenant \mathbf{x} par la relation

$$\varphi_{\eta}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}_{R,\eta}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad (2.11)$$

où $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ est la normale de la surface considérée en \mathbf{x} .

Le vecteur densité surfacique de flux permet également d'exprimer, par sa diver-

gence, le *terme source radiatif* (ou *bilan radiatif local*) :

$$S_{r,\eta}(\mathbf{x}, t) = -\text{div}(\mathbf{q}_{R,\eta}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.12)$$

Aux frontières, l'espace des directions se limite à l'hémisphère sortant (d'angle solide égal à $2\pi \text{ sr}$). On parlera alors plutôt d'*émittance* $M_\eta(\mathbf{x}, t)$ (ou de *densité de flux rayonné*) et d'*éclairage* $H_\eta(\mathbf{x}, t)$ pour des rayons respectivement dirigés vers l'extérieur et vers la surface :

$$M_\eta(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} > 0} L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) d\mathbf{u} \quad (2.13)$$

et

$$H_\eta(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0} L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) d\mathbf{u} \quad (2.14)$$

où $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ est la normale en \mathbf{x} à la surface.

Même si nous allons désormais nous concentrer essentiellement sur une approche mésoscopique, ces grandeurs macroscopiques ainsi que les images associées à la description microscopique du rayonnement mettent en relief l'intérêt de pouvoir passer d'une description à l'autre. Le **Tab. 2.1** dresse un bref résumé de ces trois types de modélisation appliqués à l'étude du transfert radiatif.

<i>Description</i>	<i>Descripteur(s)</i>	<i>Variable(s)</i>	<i>Type de descripteur</i>
Microscopique	$\{\mathbf{x}, \mathbf{u}, \eta\}$	t	déterministe et discret
Mésoscopique	L_η	$\mathbf{x}, \mathbf{u}, \eta, t$	statistique et continu
Macroscopique	$G_\eta, \mathbf{q}_{R,\eta}, \text{etc.}$	\mathbf{x}, η, t	statistique et continu

TABLE 2.1 – Résumé succinct des propriétés des descriptions microscopique, mésoscopique et macroscopique appliquées à l'étude du transfert radiatif. Les descripteurs, variables et types de descripteurs sont décrits pour chacune d'elles.

2.2 Équation du transfert radiatif en milieu participant

Définir la luminance monochromatique comme une distribution de photons (à une constante $hc\eta c$ près) permet de placer plus généralement le transfert radiatif dans une approche propre à l'étude du *transport corpusculaire*. Une telle modélisation repose alors sur un formalisme de type *équations cinétiques* ou *équations de Boltzmann* faisant appel aux concepts relatifs à la physique statistique.

Aussi, l'objet de cette section est de présenter un cas particulier des équations cinétiques : l'équation du transfert radiatif en milieu participant (ETR) sous sa forme locale et intégrale. Les différentes interactions entre milieu participant et rayonnement, nécessaires à l'établissement de l'ETR, seront ainsi abordées.

2.2.1 Transport de photons sans interaction avec le milieu

L'équation du transfert radiatif est un cas particulier des équations de transport ou cinétiques. Cette famille d'équations décrivant le transport de corpuscules est fréquemment qualifiée d'*équations de Boltzmann* [Cercignani, 1988, Piaud, 2007], en référence aux travaux de L. Boltzmann (1872) qui ont porté sur l'étude et la description de la cinétique des gaz raréfiés en hors équilibre.

L'établissement d'une équation de transport requiert cependant de poser certaines hypothèses :

- Chaque photon doit pouvoir être décrit par une position et une vitesse propres. Cette hypothèse, plaçant le photon dans une approche semi-classique, impose que les échelles d'intérêt, auxquelles se produisent les phénomènes de transfert radiatif, doivent être supérieures à celles de la longueur d'onde du rayonnement considéré.
- Les positions probables d'interaction (autrement appelés absorbeurs et diffuseurs) sont réparties de façon aléatoire, indépendante et continue dans l'espace.
- Les événements d'interaction avec le milieu, ou collisions, sont supposés quasi-instantanés et quasi-punctuels devant les échelles d'intérêt.

À ces hypothèses, propres à l'établissement des équations de transport, nous ajouterons ici d'autres hypothèses relatives uniquement au transfert radiatif :

- Les photons se déplacent en ligne droite et à vitesse constante tant qu'ils n'interagissent pas avec le milieu. Sous cette hypothèse, l'indice de réfraction est alors supposé uniforme. La norme du vecteur vitesse est donc constante, ce qui explique le passage à une description selon les directions.
- Une approximation d'équilibre thermodynamique local (ETL) est admise. Cette hypothèse consiste à considérer que l'état microscopique du système est en tout point proche d'un état d'équilibre thermodynamique dont les variables d'état seraient celles observées localement. Cette hypothèse implique en particulier que l'émission locale de photons est identique à celle qui serait rencontrée dans un milieu à l'équilibre thermodynamique soumis aux mêmes conditions que le point considéré (*cf.* [Sec. 2.2.2.2](#)). Bien qu'adaptée pour les problèmes présentés dans ce manuscrit, l'hypothèse d'équilibre thermodynamique ne peut être faite lors de l'étude du rayonnement dans des configurations à très faibles pressions ou dans des systèmes chimiluminescents.
- Les photons n'interagissent pas entre-eux, ils ne peuvent pas être émis, absorbés ou diffusés par d'autres photons. La physique du transport photonique est alors qualifiée de linéaire.

Supposons dans un premier temps, pour établir l'équation du transfert radiatif, que le rayonnement n'interagit pas avec le milieu (le milieu est alors considéré comme *transparent*). Sans absorption ni diffusion, les photons se propagent en ligne droite (voir [Fig. 2.5](#)). L'ensemble des photons de nombre d'onde η situés en \mathbf{x} dans la direction \mathbf{u} à l'instant t ou leur équivalent sous forme de luminance, translatent donc

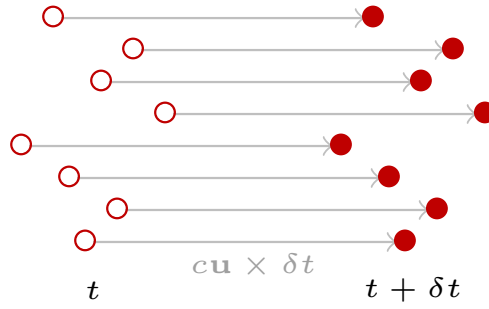


FIGURE 2.5 – Sans interaction avec le milieu les photons se propagent en lignes droites. Les photons situés en \mathbf{x} à l’instant t dans la direction \mathbf{u} se retrouvent à l’instant $t + \delta t$ en $\mathbf{x} + c\mathbf{u}\delta t$ dans la direction \mathbf{u} .

pendant un court intervalle de temps δt vers la position $\mathbf{x} + c\mathbf{u}\delta t$ sans changement de direction. Avec les hypothèses considérées, le théorème de Liouville énonce que le volume de l’espace des phases est constant le long des trajectoires du système. On peut donc écrire :

$$L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = L_\eta(\mathbf{x} + c\mathbf{u}\delta t, \mathbf{u}, t + \delta t) \quad (2.15)$$

Il est possible de faire un développement limité au premier ordre autour de \mathbf{x} et t du terme de droite en supposant δt très petit :

$$L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + \delta t \left[\frac{\partial L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial t} + c\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \right] \quad (2.16)$$

Il vient alors

$$\frac{1}{c} \frac{\partial L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.17)$$

qui n’est rien d’autre qu’une expression de la conservation de la luminance. Le premier terme $\frac{1}{c} \partial_t L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ de l’Eq. 2.17 caractérise la variation temporelle de la luminance. Le second $\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$, appelé terme de transport pur, caractérise la variation de la luminance due au déplacement des photons.

Intégré sur l’espace des directions (4π) et sur les nombres d’onde, on obtient une équation macroscopique de conservation d’énergie :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial G(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\text{div}(\mathbf{q}_R(\mathbf{x}, t)) \quad (2.18)$$

Le transfert radiatif étant généralement beaucoup plus rapide que les autres phénomènes observés, il est courant de le considérer en régime stationnaire, menant alors à :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.19)$$

Cette hypothèse de stationnarité du rayonnement sera conservée dans la suite de ce manuscrit.

2.2.2 Interactions rayonnement/matière en milieu participant

Dès lors que l'on suppose le milieu *participant* ou *semi-transparent*, il convient de prendre en compte les différents phénomènes d'interaction qui vont entrer en jeu dans la description du transport de photons. En effet, le milieu participant sera susceptible d'émettre, d'absorber et de diffuser des photons (voir Fig. 2.6). Ces trois

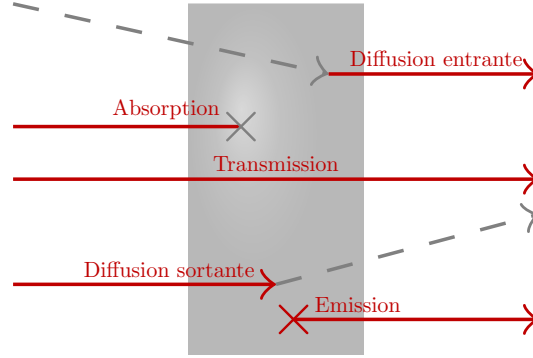


FIGURE 2.6 – Interactions entre rayonnement et milieu participant. En présence d'un milieu participant, le rayonnement peut être transmis (pas d'interaction), absorbé, émis ou diffusé par le milieu. On distingue deux types de diffusion, la diffusion entrante et sortante (selon que le rayonnement "entre" ou "sort" d'un volume élémentaire de l'espace des phases.)

types d'interaction et leurs grandeurs associées font l'objet de cette sous-section dans laquelle le rayonnement est supposé stationnaire.

2.2.2.1 Absorption du rayonnement par un milieu participant

De manière spontanée, la matière absorbe du rayonnement (le mécanisme moléculaire quantique associé à cette absorption sera présenté plus en détail à la Sec. 2.3). La variation de luminance, due à ce phénomène, le long d'un élément différentiel $d\mathbf{x}$ est donnée par :

$$\mathcal{P}_{a,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \left. \frac{dL_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{d\mathbf{x}} \right|_{\text{abs}} = k_{a,\eta}(\mathbf{x}, t) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.20)$$

où $k_{a,\eta}(\mathbf{x}, t)$ est appelé *coefficient d'absorption*.

Le coefficient d'absorption caractérise le milieu et non le rayonnement. Homogène à l'inverse d'une distance (m^{-1}), il est défini comme l'inverse du libre parcours moyen d'absorption (c'est-à-dire l'inverse de la distance moyenne que parcourent les photons avant d'être absorbés) et correspond donc à une fréquence spatiale d'absorption. Plus il est important, plus le milieu participant sera absorbant. Sa valeur dépend de la température $T(\mathbf{x})$, de la pression $P(\mathbf{x})$ et des fractions molaires $\chi_m(\mathbf{x})$ des espèces en présence au point \mathbf{x} , à l'instant t et au nombre d'onde η d'intérêt. L'isotropie du coefficient d'absorption est généralement admise.

Il est courant de décomposer le coefficient d'absorption comme le produit d'une densité volumique $C_m(\mathbf{x})$ d'absorbeurs (ici des molécules) et d'une section efficace

d'absorption $\sigma_\eta(\mathbf{x})$ ⁶ :

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = C_m(\mathbf{x})\sigma_\eta(\mathbf{x}). \quad (2.21)$$

2.2.2.2 Émission de rayonnement thermique par le milieu participant

Tout corps à une température supérieure à $0K$ émet également de façon spontanée du rayonnement thermique. Pour présenter ce phénomène, il convient d'introduire la notion de luminance d'équilibre $L_\eta^{eq}(\mathbf{x})$ ⁷. Sa définition s'accompagne généralement de l'idée de corps noir qui constitue un corps idéal absorbant l'intégralité du rayonnement lui parvenant. A l'équilibre, le corps noir émettra autant d'énergie qu'il en absorbe. Il peut être imaginé comme une cavité close et isotherme. En tout point de cette enceinte, la luminance est alors uniforme et isotrope. Cette luminance monochromatique, dite d'équilibre ou de corps noir, dépend uniquement de la température de la cavité et du nombre d'onde (voir Fig. 2.7). Son expression est donnée par la *loi de Planck* :

$$L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) = 2hc^2\eta^3 \frac{1}{\exp\left(\frac{hc\eta}{k_B T(\mathbf{x})}\right) - 1} \quad (2.22)$$

où $k_B = 1.38065 \times 10^{-23} J.K^{-1}$ est la *constante de Boltzmann*.

La luminance d'équilibre, comme toute luminance, voit sa définition varier selon qu'elle est exprimée en fréquence, nombre d'onde ou longueur d'onde : $L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) \neq L_{\nu=c\eta}^{eq}(\mathbf{x}) \neq L_{\lambda=1/\eta}^{eq}(\mathbf{x})$. Ce n'est qu'une fois intégrée que l'équivalence est vérifiée :

$$L_\eta^{eq}(\mathbf{x})d\eta = L_{\nu=c\eta}^{eq}(\mathbf{x})d\nu = L_{\lambda=1/\eta}^{eq}(\mathbf{x})d\lambda \quad (2.23)$$

Les lois de Planck définies selon les fréquences et longueurs d'onde sont alors respectivement données par :

$$L_\nu^{eq}(\mathbf{x}) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T(\mathbf{x})}\right) - 1} \quad (2.24)$$

et

$$L_\lambda^{eq}(\mathbf{x}) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B \lambda T(\mathbf{x})}\right) - 1} \quad (2.25)$$

NOTE : Loi de Stefan Boltzmann et loi du déplacement de Wien

Il peut être intéressant d'intégrer et de dériver la loi de Planck, pour notamment obtenir la luminance d'équilibre totale et la luminance d'équilibre maximale (et son nombre d'onde associé) pour une température donnée.

6. La section efficace n'a pas de lien avec la taille réelle des absorbeurs, elle représente une surface virtuelle susceptible d'intercepter le rayonnement.

7. Il est fréquent de trouver dans la littérature d'autres notations de cette luminance d'équilibre : $L_\eta^0(\mathbf{x})$, $I_{b,\eta}(\mathbf{x})$ ou encore $B_\eta(\mathbf{x})$.

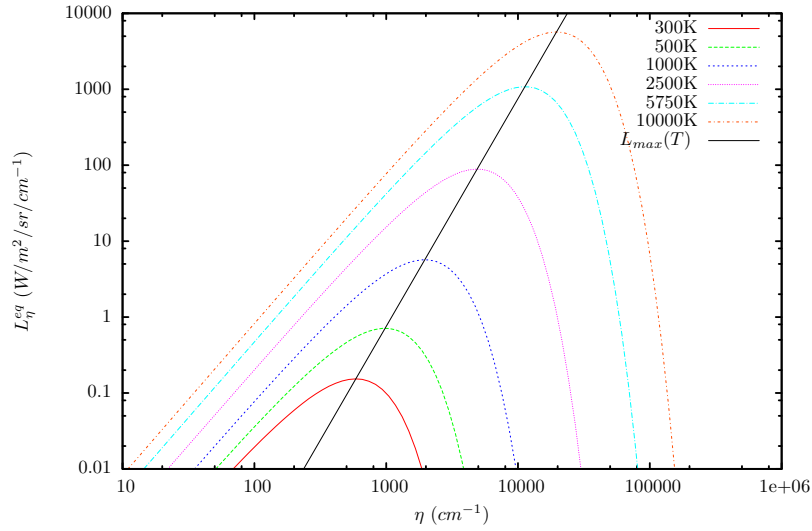


FIGURE 2.7 – Luminance d'équilibre définie en nombre d'onde pour différentes températures. La loi du déplacement de Wien (trait plein noir) est également présentée.

Loi de Stefan-Boltzmann La *loi de Stefan-Boltzmann* exprime la luminance totale d'équilibre intégrée sur l'intégralité du spectre ($[0, +\infty[$) :

$$L^{eq}(\mathbf{x}) = \int_0^{+\infty} L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}) d\eta = \frac{1}{\pi} \sigma T(\mathbf{x})^4 \quad (2.26)$$

où $\sigma = 5.670373 \times 10^{-8}$ est dite la *constante de Stefan-Boltzmann*. On remarque alors que la luminance totale d'équilibre est bien proportionnelle à la température élevée à la puissance 4.

Loi du déplacement de Wien La *loi du déplacement de Wien* exprime le nombre d'onde, la fréquence ou la longueur d'onde pour laquelle, à une température donnée, la luminance d'équilibre est maximale. Ces nombres d'onde, longueurs d'onde et fréquences sont alors donnés par les relations suivantes.

$$\eta(L_{\eta, \max}^{eq}(T)) = T \times 1.961 \text{ cm}^{-1} \quad (2.27)$$

$$\nu(L_{\nu, \max}^{eq}(T)) = T \times 5.879 \times 10^{10} \text{ Hz} \quad (2.28)$$

$$\lambda(L_{\lambda, \max}^{eq}(T)) = \frac{1}{T} \times 2898 \mu\text{m} \quad (2.29)$$

La loi du déplacement de Wien est illustrée par la courbe noire de la [Fig. 2.7](#).

Dès qu'il s'agit d'étudier les milieux participants, il est nécessaire d'introduire, en plus de la luminance d'équilibre, la notion de coefficient d'émission $k_{e,\eta}(\mathbf{x})$ qui va permettre d'exprimer la variation de luminance associée à l'émission le long d'un

élément $d\mathbf{x}$:

$$\mathcal{S}_{e,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \left. \frac{dL_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{d\mathbf{x}} \right|_{\text{emiss}} = k_{e,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) \quad (2.30)$$

$\mathcal{S}_{e,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ est donc égale au produit de la luminance d'équilibre (dépendant de la seule température au point \mathbf{x}) et du coefficient d'émission. $\mathcal{S}_{e,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ correspond alors à un taux spatial d'émission.

Sous l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local, si l'on ne considère que l'absorption et l'émission, la condition

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{e,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= \mathcal{P}_{a,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ \Leftrightarrow k_{e,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) &= k_{a,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \end{aligned} \quad (2.31)$$

se doit d'être vérifiée. Or, puisqu'à l'équilibre thermique (*cf.* corps noir), la luminance est par définition la luminance d'équilibre : $L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = L_\eta^{eq}(\mathbf{x})$, les coefficients d'émission et d'absorption sont donc deux grandeurs équivalentes. On oubliera donc la notion de coefficient d'émission au profit de celle de coefficient d'absorption. Cette équivalence est connue comme la *loi du rayonnement de Kirchhoff* en hommage à G.R. Kirchhoff qui l'a formulée en 1859.

2.2.2.3 Diffusion du rayonnement par un milieu participant

Enfin, le dernier type d'interaction entre rayonnement et matière est la *diffusion*⁸ [Kerker, 1969, Sheng, 2006, Boulet *et al.*, 2014]. Celle-ci entraîne un changement de direction du photon incident. Plusieurs hypothèses seront admises dans ce manuscrit concernant la diffusion :

- La polarisation du rayonnement n'est pas prise en compte.
- Les diffusions sont supposées élastiques : l'énergie (ou le nombre d'onde) du photon reste conservée pendant sa diffusion.
- La diffusion est supposée indépendante : les diffuseurs sont suffisamment éloignés pour considérer que la diffusion provoquée par une particule n'influe pas sur les diffusions d'autres particules.

Deux éléments caractéristiques du milieu diffusant sont nécessaires pour modéliser la diffusion du rayonnement : le *coefficient de diffusion* $k_{d,\eta}(\mathbf{x})$ et la *fonction de phase* $\phi_\eta(\mathbf{u}'|\mathbf{u}, \mathbf{x})$.

Le coefficient de diffusion $k_{d,\eta}(\mathbf{x})$ est l'analogue pour la diffusion du coefficient d'absorption. Il est défini comme l'inverse du libre parcours de diffusion (distance moyenne que parcourt un photon avant d'être diffusé) et correspond donc à une fréquence spatiale de diffusion, homogène à des m^{-1} . La somme du coefficient d'absorption et du coefficient de diffusion $k_\eta(\mathbf{x}) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x})$ est appelé *coefficient d'extinction* et est défini comme l'inverse du libre parcours moyen d'extinction (distance moyenne avant qu'un photon ne soit absorbé ou diffusé). On peut également

8. On parle ici de diffusion, dans le sens de "scattering" et non de "diffusion" en anglais.

définir à partir de ces deux coefficients des grandeurs adimensionnelles : l'albédo de diffusion simple $\omega_{d,\eta}(\mathbf{x})$ défini comme :

$$\omega_{d,\eta}(\mathbf{x}) = \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x})}{k_{\eta}(\mathbf{x})} = \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x})}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x})} \quad (2.32)$$

et l'albédo d'absorption $\omega_{a,\eta}(\mathbf{x})$:

$$\omega_{a,\eta}(\mathbf{x}) = 1 - \omega_{d,\eta}(\mathbf{x}) = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x})}{k_{\eta}(\mathbf{x})} = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x})}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x})} \quad (2.33)$$

Plus l'albédo de diffusion est proche de 1, plus la diffusion sera prédominante devant l'absorption.

La fonction de phase $\phi_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}'|\mathbf{u})$ représente quant à elle, la probabilité qu'un photon de direction incidente \mathbf{u} diffuse dans une direction \mathbf{u}' . Il est souvent difficile de caractériser ces fonctions de phase, on peut alors se ramener alors à des modèles approchés. Au cours de ces travaux de thèse, nous nous limiterons aux milieux isotropes. Les fonctions de phase considérées ne sont alors dépendantes que de l'angle de déflexion θ illustré par la Fig. 2.8.

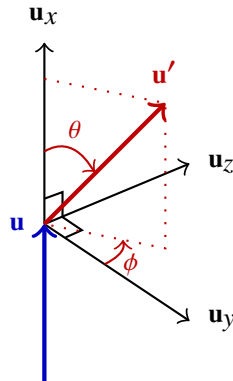


FIGURE 2.8 – La fonction de phase associée à la diffusion d'un photon de direction incidente \mathbf{u} dans la direction \mathbf{u}' est décrite par le seul angle de déflexion θ (la probabilité associée à l'angle ϕ est uniforme).

Nous décrivons ici seulement les trois seuls modèles utilisés dans la suite de ce manuscrit :

- *La fonction de phase isotrope* (voir Fig. 2.9a) est définie de sorte que la probabilité associée à toutes les directions \mathbf{u}' quel que soit \mathbf{u} soit uniforme :

$$\phi_{\eta,\text{Isotrope}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}'|\mathbf{u}) = \frac{1}{4\pi} \quad (2.34)$$

- *La fonction de phase d'Henyey-Greenstein* (voir Fig. 2.9b) permet de rendre compte de diffusions fortement anisotropes. Elle est très utilisée du fait de sa

simplicité d'utilisation et de sa bonne représentativité pour de larges domaines d'applications. En effet, elle ne dépend que d'un seul paramètre $g(\mathbf{x})$ appelé *facteur d'asymétrie* et s'exprime comme :

$$\phi_{\eta, \text{Heney-Greenstein}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}'|\mathbf{u}) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g(\mathbf{x})^2}{(1 + g(\mathbf{x})^2 - 2g(\mathbf{x}) \cos(\theta))^{3/2}} \quad (2.35)$$

- La *fonction de phase de Rayleigh* (voir Fig. 2.9c) est un modèle approché fréquemment utilisé dans des configurations où le paramètre de taille des diffuseurs est très petit ($2\pi a/\lambda \ll 1$ avec a une dimension caractéristique du diffuseur et λ la longueur d'onde du rayonnement). Son expression est donnée par :

$$\phi_{\eta, \text{Rayleigh}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}'|\mathbf{u}) = \frac{3}{16\pi} (1 + \cos^2(\theta)) \quad (2.36)$$

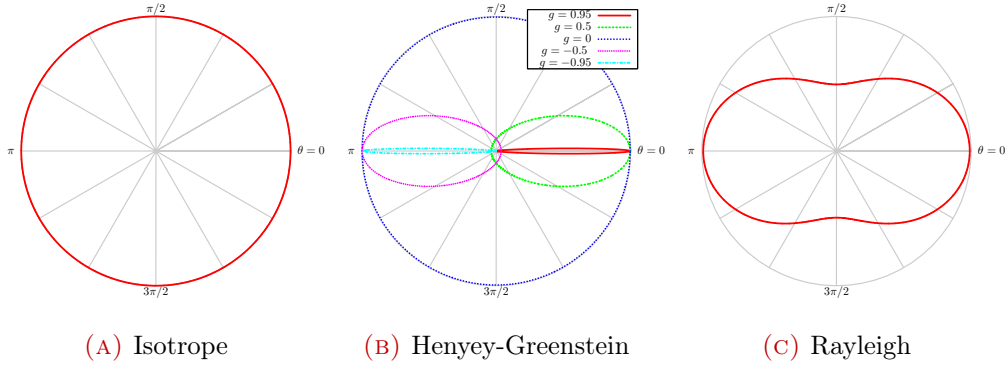


FIGURE 2.9 – Représentation des trois fonctions de phase utilisées dans ce manuscrit : en (A) la fonction de phase isotrope, en (B) la fonction d'Heney-Greenstein pour différents paramètres d'asymétrie g et en (C) la fonction de phase de Rayleigh. Les échelles sont arbitraires.

Lorsque l'on se place en un point de l'espace des phases \mathcal{D} et plus précisément lorsque l'on s'attachera à un angle solide $d\mathbf{u}$, on distinguera deux types de diffusion (strictement équivalentes d'un point de vue physique) les diffusions entrantes et sortantes (respectivement "in-scattering" et "out-scattering" en anglais).

Diffusion entrante On parle de diffusion entrante lorsqu'un photon de direction incidente \mathbf{u}' diffuse et voit sa nouvelle direction comprise dans l'angle solide d'intérêt $d\mathbf{u}$. L'augmentation locale de luminance le long d'un élément $d\mathbf{x}$ due à ce phénomène de diffusion entrante est alors donnée par :

$$\mathcal{S}_{d^+, \eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \left. \frac{dL_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{d\mathbf{x}} \right|_{\text{diff. entrante}} = k_{d, \eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \phi_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}'|\mathbf{u}) L_{\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \quad (2.37)$$

Diffusion sortante On parle de diffusion sortante lorsqu'un photon, dont la direction incidente est comprise dans l'angle solide d'intérêt $d\mathbf{u}$, diffuse dans une direction \mathbf{u}' non comprise cette fois dans l'angle solide d'intérêt. La diminution de

luminance le long d'un élément $d\mathbf{x}$ associée à ce phénomène de diffusion entrante est alors donnée par :

$$\mathcal{P}_{d^-, \eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \left. \frac{dL_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{d\mathbf{x}} \right|_{\text{diff. sortante}} = k_{d, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.38)$$

La prise en compte rigoureuse de la diffusion est en pratique complexe et fait appel à des considérations ondulatoires (résolution des équations de Maxwell). Ne faisant pas l'objet des travaux présentés dans ce manuscrit, la diffusion sera uniquement prise en compte en toute généralité dans les méthodes numériques développées.

2.2.3 Formulation locale de l'équation du transfert radiatif

La prise en compte des termes sources et puits relatifs à l'absorption, l'émission et la diffusion du rayonnement (présentés à la [Sec. 2.2.2](#)) dans le modèle de transport de photons (voir [Eq. 2.19](#)) mène donc, au régime stationnaire, à l'équation du transfert radiatif suivante :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \mathcal{P}_{a, \eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \mathcal{P}_{d^-, \eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \mathcal{S}_{e, \eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \mathcal{S}_{d^+, \eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.39)$$

La somme de ces termes sources (terme de gauche) est connue dans la physique du transport corpusculaire sous le nom de *terme collisionnel*, chacune des interactions possibles entre rayonnement et matière étant qualifiée de *collision*. Une fois ces termes collisionnels exprimés, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = & -k_{a, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) - k_{d, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + k_{a, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) \\ & + k_{d, \eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{u}|\mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \end{aligned} \quad (2.40)$$

Il est alors possible d'observer les effets de l'approximation d'équilibre thermodynamique local posée à la [Sec. 2.2.1](#). Cette hypothèse a en effet conduit à une expression du terme collisionnel telle qu'à l'équilibre thermodynamique l'équation du transfert radiatif soit validée. En effet, par définition, l'équilibre implique que le terme de transport pur soit nul : $\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = 0$. La luminance d'équilibre étant isotrope, il en résulte :

$$0 = -k_{a, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) - k_{d, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) + k_{a, \eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) + k_{d, \eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{u}|\mathbf{u}') L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) d\mathbf{u}' \quad (2.41)$$

Cette égalité est bien validée puisque les termes d'absorption/d'émission, ainsi que les termes de diffusion s'annulent deux à deux.

2.2.4 Formulation intégrale de l'équation du transfert radiatif

Le transport de photon étant linéaire (les photons ne collisionnent pas entre-eux), il est facilement possible, grâce au principe de superposition, de reformuler l'équation du transfert radiatif sous une forme intégrale. En effet, pour un jeu de conditions aux frontières donné, l'équation du transfert radiatif admet une unique

solution qui peut être exprimée sous forme intégrale. Ces solutions intégrales, leurs valeurs statistiques, ainsi que les images physiques qui leur sont associées seront plus longuement abordées au **Chap. 3**. Puisqu'il existe une infinité de configurations d'étude et donc de formulations intégrales, cette sous-section n'a pour objet que de présenter les éléments essentiels au passage de l'équation locale du transfert radiatif à son analogue intégral : l'atténuation exponentielle et l'émission de la luminance par un milieu participant. Les différentes conditions aux frontières seront dans un premier temps rappelées.

2.2.4.1 Conditions aux frontières

On distingue trois types d'interaction rayonnement/frontière : l'émission, l'absorption et la réflexion du rayonnement par la paroi.

Une paroi absorbant l'intégralité du rayonnement lui parvenant constitue un corps noir. La luminance émise par une telle paroi est donc une luminance d'équilibre : elle dépend, pour un nombre d'onde donné, uniquement de la température de la paroi. Cependant, une telle paroi n'est qu'une représentation idéale, toute paroi réelle réfléchit au moins partiellement le rayonnement lui parvenant. En un point \mathbf{x}_w de la paroi, la fraction réfléchi de rayonnement pour une direction et un nombre d'onde donnés est appelée *réflectivité* et est notée $\rho_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$. Cette réflectivité vérifie l'égalité

$$\rho_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \alpha_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = 1 \quad (2.42)$$

où $\alpha_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ est l'*absorptivité* de la paroi, qui correspond à la fraction de luminance absorbée par la paroi. Sous l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local, cette absorptivité est égale à la *émissivité* $\varepsilon_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, une grandeur définie comme le ratio entre la luminance monochromatique émise par la paroi en \mathbf{x}_w dans la direction \mathbf{u} et la luminance d'équilibre qu'aurait un corps noir à la même température que la paroi :

$$\varepsilon_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_w, \mathbf{u})}{L_\eta^{eq}(T(\mathbf{x}_w))} = \alpha_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = 1 - \rho_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.43)$$

Concernant le type de réflexion, nous ne considérerons que deux cas extrêmes dans ce manuscrit : les réflexions dites *spéculaire* et *diffuse* :

- Une surface est dite diffuse si $\alpha_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \varepsilon_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = 1 - \rho_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ ne dépendent pas de la direction. La distribution bi-directionnelle de réflexion notée $\psi_\eta(\mathbf{x})$ est donc dans ce cas uniforme et égale à $1/2\pi$: la probabilité qu'un photon incident dans la direction \mathbf{u} soit réfléchi dans une direction \mathbf{u}' est identique quelle que soit \mathbf{u}' compris dans l'hémisphère extérieur de la paroi. Une telle paroi est qualifiée de *Lambertienne*, en référence à la loi de Lambert qui énonce ce principe.
- Le deuxième type de réflexion traitée est la réflexion spéculaire, cette réflexion répond à la loi de Descartes qui stipule que le rayonnement est réfléchi de façon symétrique par rapport à la normale de la surface en \mathbf{x}_w .

2.2.4.2 Atténuation exponentielle et absence de mémoire

L'équation locale du transfert radiatif associée à des conditions aux frontières, telles que présentées précédemment, admet donc une unique solution exprimable sous la forme d'une expression intégrale. On parle alors d'équation du transfert radiatif sous forme intégrale. Le passage le plus délicat de l'équation locale à son équivalente intégrale réside très certainement dans l'objet de ce paragraphe : l'atténuation du rayonnement le long d'un chemin optique.

Concentrons-nous d'abord sur la probabilité qu'un photon de nombre d'onde η émis en x_0 d'être transmis sur une distance l dans un milieu participant homogène et non diffusant sans avoir été absorbé. Cette probabilité, notée $\mathcal{T}_\eta(l)$, porte le nom de *transmissivité*. En ayant posé l'hypothèse de distribution aléatoire des absorbeurs, il est possible d'écrire cette probabilité comme le produit de la probabilité qu'aurait un photon d'être transmis sur une distance l_1 et de celle d'être transmis sur une distance l_2 telles que $l_1 + l_2 = l$:

$$\mathcal{T}_\eta(l) = \mathcal{T}_\eta(l_1) \times \mathcal{T}_\eta(l_2) \quad (2.44)$$

En d'autres termes, cela signifie que sous cette hypothèse, la probabilité qu'un photon a de parcourir une certaine distance sans avoir été absorbé ne dépend pas de son histoire ou de la distance qu'il a déjà parcourue. Cette propriété, courante en physique (*ex* : désintégration nucléaire, décharge électrique d'un condensateur, *etc.*) est qualifiée d'*absence de mémoire*. L'unique expression de la transmissivité validant l'Eq. 2.44 est alors :

$$\mathcal{T}_\eta(l) = \exp\left(-\frac{l}{\beta}\right) \quad (2.45)$$

où β est une valeur strictement positive caractérisant le libre parcours moyen d'absorption. Or dans la Sec. 2.2.2.1, nous avons défini le coefficient d'absorption comme l'inverse du libre parcours moyen. Il vient alors :

$$\mathcal{T}_\eta(l) = \exp(-k_{a,\eta}l) \quad (2.46)$$

Cette loi caractérise donc l'extinction ou l'atténuation exponentiellement du rayonnement due à l'absorption. Elle est connue sous le nom de *loi de Beer-Lambert* et peut être étendue à un milieu hétérogène par :

$$\mathcal{T}_\eta(x_a, x_b) = \exp\left(-\int_{x_a}^{x_b} k_{a,\eta}(x')dx'\right) = \exp(-\tau_\eta(x_a, x_b)) \quad (2.47)$$

où $\mathcal{T}_\eta(x_a, x_b)$ correspond à la probabilité qu'un photon soit transmis entre x_a et x_b et où $\tau_\eta(x_a, x_b) = \int_{x_a}^{x_b} k_{a,\eta}x'dx'$ est appelée *épaisseur optique*. Cette grandeur adimensionnelle donne une information sur le caractère absorbant d'un milieu le long d'un chemin optique (ici $[x_a, x_b]$). Pour $\tau_\eta(x_a, x_b) \ll 1$ le milieu est dit *mince* : l'essentiel du rayonnement sera transmis le long de $[x_a, x_b]$. Au contraire pour $\tau_\eta(x_a, x_b) > 5$, le milieu est qualifié d'*épais*, une très faible proportion du

rayonnement sera transmis, l'essentiel étant absorbé.

Si l'on suppose à nouveau que le milieu est homogène, il est possible de poursuivre ce raisonnement sous un aspect différentiel. Considérons désormais la probabilité $p_{\mathcal{L}}(l)dl$ qu'un photon soit absorbé après avoir parcouru une distance élémentaire dl . La grandeur $p_{\mathcal{L}}(l)dl$ correspond alors à la probabilité qu'un photon parcoure une distance supérieure à l mais inférieure à $l + dl$. On peut donc écrire :

$$p_{\mathcal{L}}(l)dl = \mathcal{T}_{\eta}(l) - \mathcal{T}_{\eta}(l + dl) \quad (2.48)$$

Sous un formalisme différentiel, il vient à partir de l'Eq. 2.46 et de l'Eq. 2.48 :

$$p_{\mathcal{L}}(l) = -\frac{d\mathcal{T}_{\eta}(l)}{dl} = k_{a,\eta} \exp(-k_{a,\eta}l) \quad (2.49)$$

où $p_{\mathcal{L}}(l)$ correspond alors à la densité de probabilité des libres parcours d'absorption l et peut être également définie pour un milieu hétérogène par :

$$p_{\mathcal{L}}(l) = k_{a,\eta}(x_a + l) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(x_a + l')dl'\right) \quad (2.50)$$

où $p_{\mathcal{L}}(l)$ est la fonction densité de probabilité des libres parcours l pour des photons ayant été émis en x_a . Cette densité de probabilité est normalisée sur $[0, +\infty[$. En effet, la probabilité qu'un photon soit absorbé par un milieu absorbant sur un chemin infini est bien égale à un.

NOTE : Perte de l'absence de mémoire lors de l'intégration spectrale

L'absence de mémoire et l'atténuation exponentielle associée ne sont valables que pour des grandeurs monochromatiques. Dès lors que l'on intègre les grandeurs d'intérêt sur une plage de nombres d'onde, ces comportements exponentiels ne sont plus respectés. Une façon de s'en convaincre consiste à considérer la transmissivité globale $\mathcal{T}_{\eta}(l)$ de deux couches homogènes : l'une d'épaisseur l_1 et de coefficient d'absorption $k_{a,\eta,1}$, l'autre de dimension l_2 et de coefficient d'absorption $k_{a,\eta,2}$ telles que $l = l_1 + l_2$.

Comme nous venons de le voir, il est possible d'écrire de façon monochromatique :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\eta}(l) &= \exp(-k_{a,\eta,1}l_1 - k_{a,\eta,2}l_2) \\ &= \exp(-k_{a,\eta,1}l_1) \times \exp(-k_{a,\eta,2}l_2) \\ &= \mathcal{T}_{\eta}(l_1) \times \mathcal{T}_{\eta}(l_2) \end{aligned} \quad (2.51)$$

Mais dès que l'on souhaite intégrer spectralement cette transmissivité sur $\Delta\eta$, il vient :

$$\mathcal{T}(l) = \int_{\Delta\eta} \mathcal{T}_{\eta}(l)d\eta = \int_{\Delta\eta} \mathcal{T}_{\eta}(l_1) \times \mathcal{T}_{\eta}(l_2)d\eta \neq \mathcal{T}(l_1) \times \mathcal{T}(l_2) \quad (2.52)$$

La transmissivité globale $\mathcal{T}(l)$ intégrée spectralement est bien différente du produit des transmissivités intégrées $\mathcal{T}(l_1)$ et $\mathcal{T}(l_2)$, l'atténuation exponentielle n'est plus applicable. L'intégration spectrale crée donc un phénomène de type mémoire : alors que la distribution aléatoire des absorbeurs assurait une absence de mémoire, la distribution spectrale des photons contient, elle, de l'information relative à la distance qu'ils ont déjà parcourue.

Transmission de rayonnement par une colonne de milieu participant Il devient alors possible d'utiliser ces notions de transmissivité et de densité de probabilité de libre parcours pour exprimer la luminance transmise par une colonne. On souhaite étudier la luminance en x_b dans la direction sortante résultant d'une émission en x_a (où est placée une paroi noire) et atténuée entre x_a et x_b par un milieu non-émettant (de température nulle) et non-diffusant. À partir de la définition de la transmissivité il vient :

$$\begin{aligned} L_{\eta}^{+}(x_b) &= L_{\eta}^{eq}(x_a) \mathcal{T}_{\eta}(x_a, x_b) \\ &= L_{\eta}^{eq}(x_a) \exp \left(- \int_{x_a}^{x_b} k_{a,\eta} x' dx' \right) \end{aligned} \quad (2.53)$$

Cette équation s'interprète assez facilement : seule une fraction $\mathcal{T}_{\eta}(x_a, x_b)$ de la luminance $L_{\eta}^{eq}(x_a)$ émise en x_a est transmise jusqu'en x_b . On constate également que cette expression intégrale est bien solution de l'équation locale du transfert radiatif pour la configuration considérée (pas de diffusion ni d'émission du milieu et paroi noire en x_a). De la même manière, il est possible d'exprimer $L_{\eta}^{+}(x_b)$ en faisant appel à la distribution des libres parcours :

$$L_{\eta}^{+}(x_b) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l) \mathcal{H}(l - (x_b - x_a)) L_{\eta}^{eq}(x_a) dl \quad (2.54)$$

où la fonction de Heaviside $\mathcal{H}(l - (x_b - x_a))$ vaut 1 si $l > x_b - x_a$ et 0 sinon. Ici, les images associées à cette expression sont légèrement différentes : la luminance $L_{\eta}^{+}(x_b)$ est définie comme la fraction des photons (à une constante $hc\eta c$ près) émis par la paroi en x_a ayant eu un libre parcours supérieur à l et donc ayant bien été transmis par la colonne.

Émission de rayonnement par une colonne de milieu participant Maintenant, si l'on considère que le milieu émet en plus d'absorber et que la paroi n'émet plus, il est possible d'exprimer la luminance en x_b dans la direction sortante résultant d'une émission de rayonnement par le milieu défini sur $[x_a, x_b]$ atténuée exponentiellement jusqu'en x_b . Les hypothèses d'équilibre thermodynamique local et de stationnarité imposent que la fraction de rayonnement absorbée le long d'un chemin optique est égale à celle émise par ce même milieu. On peut alors définir l'absorptivité $\mathcal{A}_{\eta}(x_a, x_b)$ du milieu, qui représente la probabilité qu'un photon soit absorbé sur une distance $[x_a, x_b]$ donnée. Celle-ci correspond à la probabilité complémentaire de la

transmissivité :

$$\mathcal{A}_\eta(x_a, x_b) = 1 - \mathcal{T}_\eta(x_a, x_b) \quad (2.55)$$

En effet, sur une distance donnée, en l'absence de diffusion, soit le photon est absorbé, soit il est transmis.

En supposant le milieu isotherme de luminance d'équilibre L_η^{eq} , la luminance $L_\eta^+(x_b)$ est alors donnée par

$$L_\eta^+(x_b) = L_\eta^{eq} (1 - \mathcal{T}_\eta(x_a, x_b)) \quad (2.56)$$

La luminance $L_\eta^+(x_b)$ correspond alors la luminance d'équilibre du milieu pondérée de la fraction émise sur $[x_a, x_b]$.

En faisant appel à la densité de probabilité des libres parcours, on peut également écrire pour un milieu anisotherme :

$$L_\eta^+(x_b) = \int_{x_a}^{x_b} k_{a,\eta}(x) \exp\left(-\int_x^{x_b} k_{a,\eta}(x') dx'\right) L_\eta^{eq}(x) \quad (2.57)$$

Dans ce cas, deux images physiques sont possibles pour interpréter cette expression de $L_\eta^+(x_b)$:

- soit on considère que sur chaque intervalle dx du milieu une luminance $k_{a,\eta}(x)L_\eta^{eq}(x)dx$ est émise et que seule une fraction $\exp\left(-\int_{x_a}^{x_b} k_{a,\eta}(x')dx'\right)$ est transmise jusqu'en x_b .
- soit que la luminance $L_\eta^+(x_b)$ est définie comme l'intégrale sur $[x_a, x_b]$ des luminances d'équilibres distribuées selon la densité de probabilité des libres parcours $p_{\mathcal{L}}(l)$.

2.2.4.3 Prise en compte de la diffusion

La prise en compte de la diffusion sera traitée plus en détail au [Chap. 3](#), cependant nous avons vu que la diffusion contribue de deux manières différentes à l'équation du transfert radiatif : la diffusion entrante et la diffusion sortante, respectivement à l'origine d'une augmentation et d'une diminution de la luminance en un point de l'espace des phases.

La disparition de luminance par diffusion est traitée de la même manière que l'atténuation du rayonnement par l'absorption. En effet, la loi de Beer-Lambert et l'absence de mémoire s'appliquent également à la diffusion, mis à part que la fréquence spatiale de disparition est donnée par le coefficient de diffusion et non par le coefficient d'absorption. Dans la pratique, on ne distinguera pas les atténuations par absorption et par diffusion. On raisonnera en termes de coefficients d'extinction. L'atténuation causée par ces deux phénomènes le long d'un chemin optique curviligne entre 0 et ς est alors donnée par :

$$\mathcal{T}_\eta(\varsigma) = \exp\left(-\int_0^\varsigma k_{a,\eta}(\varsigma') + k_{d,\eta}(\varsigma') d\varsigma'\right) = \exp\left(-\int_0^\varsigma k_\eta(\varsigma') d\varsigma'\right) \quad (2.58)$$

L'apparition de rayonnement par diffusion, est quant à elle plus délicate à prendre en compte, en particulier lorsque les événements de diffusion sont multiples. Elle implique une récursivité du fait de la présence de la luminance dans l'intégrale directionnelle du terme source $\mathcal{S}_{d,\eta}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ de l'équation locale du transfert radiatif. Cette récursivité sera présentée plus amplement à la [Sec. 3.4](#)). Cependant, l'apport par diffusion ne pose pas de problèmes intrinsèques majeurs (outre des problèmes de formalisme), il sera toujours possible d'alléger cette écriture récursive en raisonnant en abscisses curvilignes dans une vision de type *intégrales de chemins* [[Dauchet, 2012](#)].

2.3 Nature, dépendances et modèles du coefficient d'absorption en milieu gazeux

De par sa forte dépendance aux nombres d'onde, aux fractions molaires des espèces en présence et aux propriétés thermodynamiques du milieu, la prise en compte du coefficient d'absorption représente une des principales difficultés rencontrées lors de l'étude du rayonnement en milieu gazeux. Les notions d'émission et d'absorption par un milieu semi-transparent ont déjà été abordés dans le but de les placer dans une description mésoscopique. Toutefois, nous ne nous sommes pas encore intéressés aux phénomènes et mécanismes sous-jacents. Ces derniers, qui font appel à des concepts de mécanique quantique, feront l'objet de cette section (pour plus d'informations, le lecteur pourra se référer aux textes [[Tien, 1969](#), [Taine et Soufiani, 1999](#), [Heitler, 2010](#)]). La nature même du coefficient d'absorption et sa représentation sous forme de raies puis de spectres d'absorption seront ainsi abordées.

2.3.1 Mécanismes d'absorption et d'émission du rayonnement

L'approche corpusculaire du rayonnement a posé au début du XX^{ème} siècle les fondements de la mécanique quantique. Cette dernière émet, entre-autres, le postulat que les états énergétiques E_i d'une molécule sont discrets (ou quantifiés). L'énergie d'une molécule est la résultante de plusieurs formes d'énergie. Dans le cas du rayonnement, seules certaines formes d'énergie importeront, on parlera d'états énergétiques électroniques, vibrationnels et rotationnels (ici classés du plus au moins énergétique). Spontanément, ou suite à une interaction avec son environnement, la molécule peut passer d'un état énergétique élevé E_u à un plus faible E_l et inversement : de E_l à E_u . On qualifie alors ces "sauts" quantifiés de *transitions énergétiques*. Dans le cas de l'étude du rayonnement dans les gaz, on distingue trois mécanismes menant à ces transitions : l'*émission spontanée*, l'*émission stimulée* (ou émission induite ou encore absorption négative) et l'*absorption* d'un photon par la matière. Ces trois interactions sont schématisées dans la [Fig. 2.10](#). Il est possible, grâce à la mécanique quantique, de définir les coefficients d'absorption et d'émission relatifs à ces interactions en faisant appel à des modèles cinétiques, basés sur des grandeurs connues sous le nom de *coefficients d'Einstein* [[Modest, 2013](#), [André et al., 2014](#)].

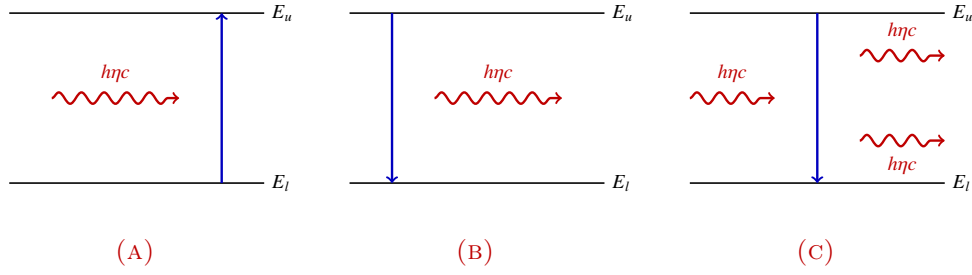


FIGURE 2.10 – Mécanismes d'interaction matière-rayonnement : (A) Absorption ; (B) Émission Spontanée ; (C) Émission Stimulée.

Émission spontanée On parle d'émission spontanée lorsqu'une molécule dans un état énergétique E_u émet un photon passant ainsi à un état énergétique inférieur E_l . Le nombre d'onde η du photon émis est directement conditionné par cette transition et répond à l'égalité

$$E_u - E_l = h\eta c \quad (2.59)$$

Absorption A l'opposé de l'émission spontanée : un photon d'énergie $h\eta c$ peut être absorbé par une molécule d'énergie E_l si cette molécule possède un état énergétique E_u validant l'Eq. 2.59.

Émission stimulée Enfin, le dernier type d'interaction photon/molécule est appelé émission stimulée. On la rencontre lorsqu'un photon de nombre d'onde "compatible" aux états énergétiques d'une molécule va la faire passer d'un état énergétique E_u à un état E_l inférieur, émettant ainsi deux photons strictement identiques d'énergie $h\eta c$. Alors que l'absorption et l'émission spontanée sont isotropiques, l'émission stimulée voit ses deux photons émis dans la direction du photon incident (cette propriété est à l'origine du développement des lasers).

2.3.2 Raie d'absorption isolée

Toute absorption et émission de photons par la matière est donc conditionnée par les états énergétiques quantifiées de la molécule considérée. Si l'on souhaitait, pour une espèce m donnée et une transition énergétique i isolée, tracer la raie d'absorption associée à cette transition (c'est-à-dire représenter le coefficient d'absorption relatif à cette transition en fonction du nombre d'onde), il serait cohérent d'imaginer cette fonction comme un Dirac centré en le nombre d'onde η validant $E_u - E_l = hc\eta$. Mais en pratique, ce n'est pas le cas. Plusieurs facteurs sont à l'origine d'un élargissement sur l'échelle des nombres d'onde de ces prétendus "Diracs". Il est alors courant de décomposer le coefficient d'absorption⁹ associé à la transition isolée i de la molécule m comme le produit d'une densité volumique d'absorbeurs $C_m(\mathbf{x})$ et d'une section efficace $\sigma_{\eta,i}(\mathbf{x})$ elle-même définie comme le produit d'une intensité de raie $S_i(\mathbf{x})$ et

9. Tout au long de ce manuscrit, nous noterons le coefficient d'absorption associée à une raie i isolée $h_{a,\eta,i}$ et le coefficient d'absorption global, résultant d'une multitude de transitions, $k_{a,\eta}$.

d'un profil de raie $f_i(\eta) \equiv f_{i,m}(\eta, \mathbf{x})$:

$$h_{a,\eta,i}(\mathbf{x}) = C_m(\mathbf{x}) \times S_i(\mathbf{x}) \times f_i(\eta) \quad (2.60)$$

où l'intensité de raie correspond à l'intégrale selon η de $\sigma_{\eta,i}(\mathbf{x})$ sur $[-\infty, +\infty]$ et le profil de raie est une fonction densité de probabilité normalisée sur $[-\infty, +\infty]$ caractérisant l'élargissement de la raie.

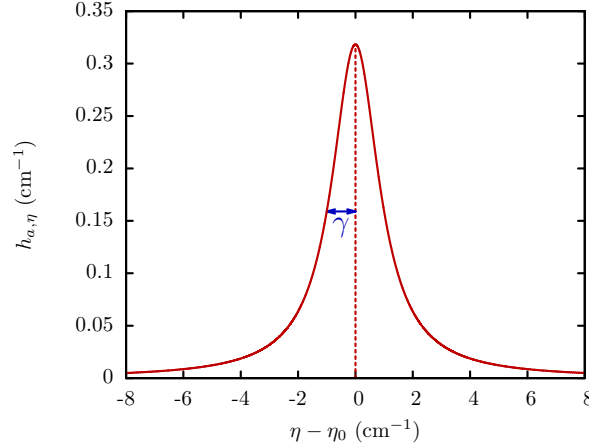


FIGURE 2.11 – Spectre d'absorption d'une raie isolée centrée en η_0 . La transition est décrite par le produit de la densité volumique de l'espèce considérée, de son intensité et du profil de raie considéré dont le paramètre principal est la demi-largeur à mi-hauteur γ .

2.3.2.1 Élargissement des raies

On dénombre quatre principaux phénomènes à l'origine de l'élargissement des raies : les élargissements collisionnels, naturels, par effet Doppler et effet Stark [Goody et Yung, 1996, Caliot, 2006, Modest, 2013].

Élargissement collisionnel La principale cause d'élargissement des raies d'absorption est attribuée aux collisions inter-moléculaires qui causent une légère variation des états énergétiques des molécules entraînant ainsi une légère variation de l'énergie (et donc du nombre d'onde) d'émission du photon. Cet élargissement est d'autant plus prononcé que le nombre de collisions est important et donc croît avec la pression.

Élargissement naturel Une autre cause d'élargissement repose sur le principe d'indétermination (énoncé par W. Heisenberg en 1927), on parle d'élargissement naturel. Une des conséquences de ce principe est qu'il n'est pas possible de connaître sans incertitude à la fois le temps d'occupation naturel d'un état énergétique et l'énergie associée à cet état, influant ainsi sur le nombre d'onde du photon émis. Toutefois, cet élargissement est généralement négligeable face à l'élargissement collisionnel.

Élargissement par effet Doppler Chaque molécule ayant une vitesse propre, il convient également de prendre l'effet Doppler en compte. En effet, si une molécule de vitesse v_m (par rapport au référentiel de l'observateur) émet un photon, l'onde

électromagnétique associée à ce photon va atteindre l'observateur avec un nombre d'onde supérieur ou inférieur au nombre d'onde théorique η_0 associé à la transition ayant conduit à l'émission. Ce nombre d'onde observé peut être supérieur ou inférieur à η_0 selon que la molécule s'éloigne ou se rapproche de l'observateur. Un tel élargissement dépend de la vitesse des molécules et sera donc d'autant plus prononcé que la pression du milieu sera faible et que sa température sera élevée.

Élargissement par effet Stark Enfin, le dernier type d'élargissement (mentionné ici à titre purement indicatif) est causé par l'effet Stark. En présence de forts champs électriques, il devient largement prédominant face aux trois autres types d'élargissement. On le rencontre particulièrement dans les gaz ionisés.

2.3.2.2 Profils de raies

Ces différents types d'élargissement se caractérisent par deux principaux profils de raies symétriques, centrés autour du nombre d'onde η_0 validant $E_u - E_l = h\eta_0 c$. Ces profils sont normalisés sur $]-\infty, +\infty[$ et traduisent l'élargissement de la raie en fonction du nombre d'onde η .

Profil de Lorentz L'élargissement collisionnel et l'élargissement naturel se caractérisent par un profil de raie de type distribution de Cauchy, couramment appelé profil de Lorentz. Il s'exprime :

$$f_{i,L}(\eta) = \frac{\gamma_L}{\pi} \frac{1}{\gamma_L^2 + (\eta - \eta_0)^2} \quad (2.61)$$

où γ_L est appelée demi-largeur de raie du profil de Lorentz (voir Fig. 2.11).

Profil de Doppler L'élargissement par effet Doppler se caractérise quant à lui par un profil de raie de la forme d'une distribution gaussienne. Il s'exprime comme :

$$f_{i,D}(\eta) = \sqrt{\frac{\ln(2)}{\pi}} \frac{1}{\gamma_D} \exp\left(-\ln(2) \frac{(\eta - \eta_0)^2}{\gamma_D^2}\right) \quad (2.62)$$

où γ_D est la demi-largeur de raie du profil de Doppler.

Profil de Voigt Il est cependant difficile de choisir entre le profil de Lorentz et celui de Doppler lorsque les collisions intermoléculaires et l'effet Doppler sont du même ordre de magnitude. Il est donc courant d'utiliser un troisième profil, appelé profil de Voigt, qui est défini comme le produit de convolution du profil de Lorentz et de celui de Doppler :

$$f_{i,V}(\eta - \eta_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{i,L}(\eta - (\eta' - \eta_0)) f_{i,D}(\eta' - \eta_0) d\eta' \quad (2.63)$$

Pour des pressions atmosphériques ou supérieures, les profils de Lorentz et de Voigt sont quasiment identiques (voir Fig. 2.12a). Ce n'est que pour des pressions

très faibles qu'une différence entre ces deux profils sera constatée et pour lesquelles le profil de Voigt - plus fidèle à la physique - devra être privilégié (voir Fig. 2.12b).

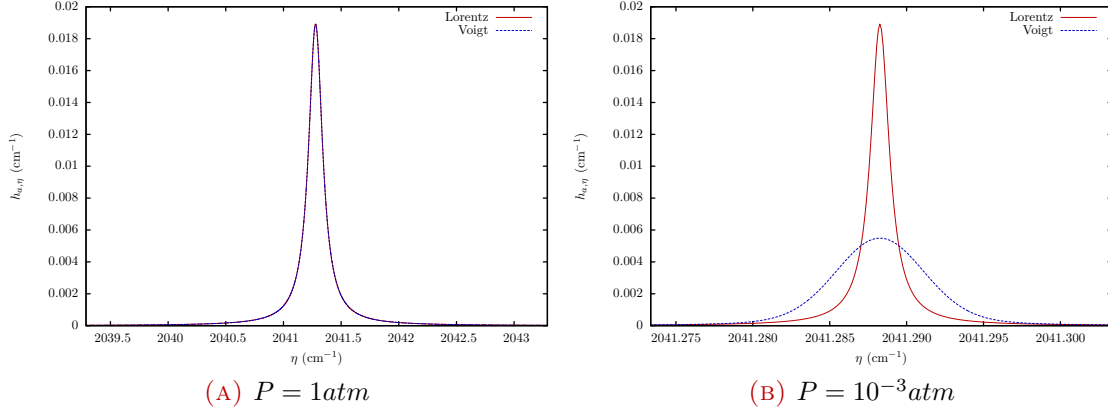


FIGURE 2.12 – Différence entre les profils de Lorentz et de Voigt pour la description d'une raie isolée. Pour une pression de $P = 1 \text{ atm}$ les deux profils sont quasiment identiques (voir Fig. (A)). Au contraire pour une pression beaucoup plus faible de $P = 10^{-3} \text{ atm}$ les deux profils se différencient très nettement à cause de l'effet Doppler qui devient dominant (voir Fig. (B)). La raie considérée est une raie de CO_2 centrée en $\eta_0 = 2041.288360 \text{ cm}^{-1}$ à une température de 300K. La fraction molaire de CO_2 est de $\chi_{\text{CO}_2} = 0.1$.

Correction de profils Il est possible que les profils de Lorentz ou de Voigt ne soient pas suffisamment satisfaisants, en particulier lorsque les pressions rencontrées sont importantes. Des modifications de ces profils [Hartmann *et al.*, 2008, Eymet *et al.*, 2009, Eymet, 2011b, André *et al.*, 2014] sont alors appliquées.

- La première d'entre-elles concerne les ailes de raie qui sont, lorsque la pression est importante, surestimées par les profils de raie usuels (de Lorentz ou de Voigt) [Burch *et al.*, 1969]. Des fonctions correctives sont alors appliquées, menant à un nouveau profil qualifié de *sub-Lorentzien* [Perrin et Hartmann, 1989, Tonkov *et al.*, 1996]. Ces surestimations des ailes de raie sont essentiellement constatées dans des bandes qualifiées de fenêtres spectrales, où les valeurs des coefficients d'absorption sont très faibles. Alors que leur impact est négligeable dans la plupart des applications de types sciences de l'ingénieur (combustion ...), il devient sensible dès lors que les épaisseurs optiques du milieu considéré deviennent importantes, en particulier pour des applications atmosphériques et astrophysiques [Bézar *et al.*, 1990].
- Les fortes pressions mettent également en défaut les profils de raies usuels pour une seconde raison. En effet, ces pressions élevées engendrent, sur des temps caractéristiques très courts, de nouvelles espèces chimiques. Ces nouveaux éléments, ayant des transitions énergétiques propres, vont avoir tendance à élargir les profils de raies étudiés. On parlera alors d'*absorption induite par collisions*. Ce phénomène est en pratique corrigé par l'ajout d'un continuum correctif au spectre d'absorption [Moskalenko, 1979, Gruszka et Borysow, 1997].

Cependant la plage de validité de ces deux types de profils correctifs demeure généralement limitée : seules quelques bandes spectrales pour quelques espèces chimiques ont aujourd'hui été paramétrées.

2.3.2.3 Comportement des raies d'absorption en fonction des conditions thermodynamiques

La pression P , la température T ainsi que la fraction molaire χ_m de l'espèce considérée vont influencer sur le profil $f_i(\eta)$ et l'intensité S_i de la raie et a fortiori sur sa section efficace $\sigma_{a,i,\eta} = f_i(\eta)S_i$ et donc sur son coefficient d'absorption $h_{a,i,\eta} = C_m \sigma_{a,i,\eta}$.

Effet de la fraction molaire. La fraction molaire de l'espèce considérée influe sur la largeur de raie et donc sur la section efficace de la transition considérée (voir Fig. 2.13a). Une augmentation de cette fraction molaire peut conduire à un élargissement ou à un rétrécissement de la raie. Le coefficient d'absorption, défini comme le produit de la section efficace et de la densité volumique de l'espèce considérée (directement proportionnel à sa fraction molaire), a une tendance à augmenter avec la fraction molaire (voir Fig. 2.13b).

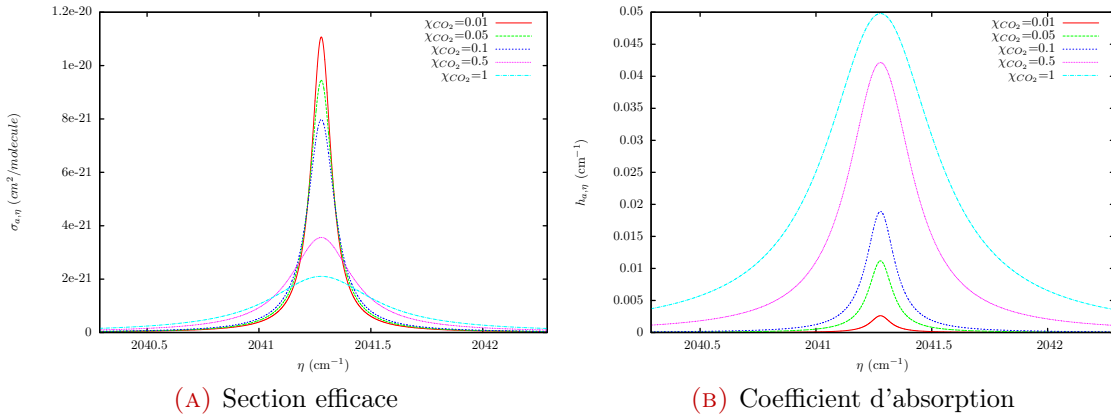


FIGURE 2.13 – Effet de la fraction molaire sur la section efficace et le coefficient d'absorption d'une raie de CO_2 isolée centrée en $\eta_0 = 2041.288360 \text{ cm}^{-1}$ à une température de 300K et une pression de 1atm . Le profil de raie considéré est un profil de Voigt.

Effet de la pression. La pression joue quant à elle un rôle à la fois sur la densité volumique de l'espèce considérée, sur sa largeur et sa composante liée à l'effet Doppler (si l'on considère un profil de Voigt) et également sur le nombre d'onde de centre de raie. De façon générale, on constate qu'une augmentation de la pression a pour conséquence un aplatissement de la raie d'absorption et au contraire que de très faibles pressions engendrent des raies proches de Diracs (voir Fig. 2.14). En considérant un profil de Voigt, plus la pression est élevée, plus le coefficient d'absorption aura tendance à être important.

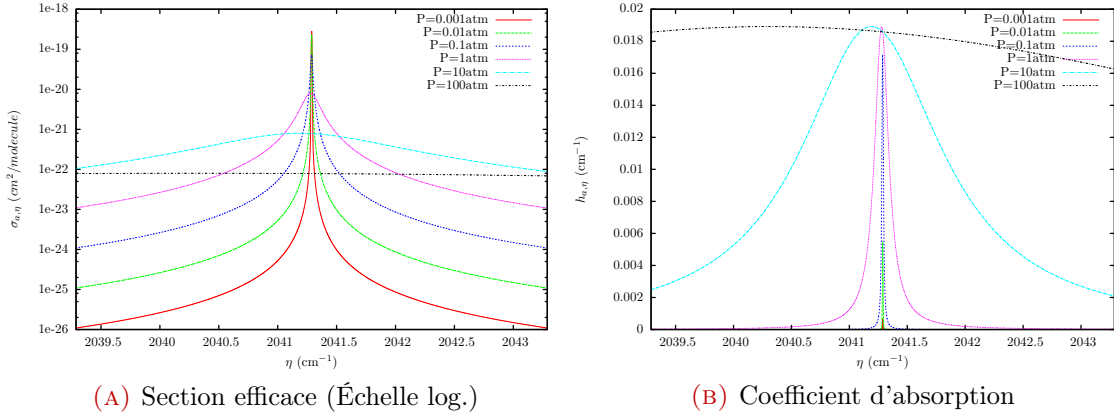


FIGURE 2.14 – Effet de la pression sur la section efficace (donnée avec une échelle logarithmique) et le coefficient d'absorption d'une raie de CO₂ isolée centrée en $\eta_0 = 2041.288360 \text{ cm}^{-1}$ à une température de 300 K . La fraction molaire de CO₂ est de $\chi_{\text{CO}_2} = 0.1$ et le profil de raie considéré est un profil de Voigt.

Effet de la température Enfin, la température est l'élément à l'origine du plus grand nombre de sources de variation du coefficient d'absorption. Plus elle est importante, plus la densité volumique de l'espèce considérée est faible. La température influe également de façon complexe et non monotone sur l'intensité et la largeur de raie selon la transition considérée (voir Fig. 2.15). Il est fréquent de constater une augmentation substantielle du coefficient d'absorption de certaines raies avec la température, alors que pour les mêmes conditions, d'autres tendent à disparaître.

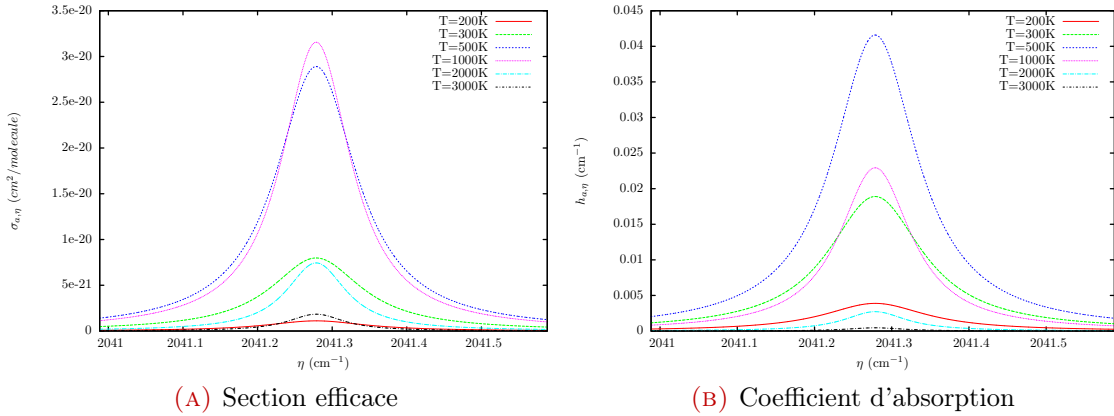


FIGURE 2.15 – Effet de la température sur la section efficace et le coefficient d'absorption d'une raie de CO₂ isolée centrée en $\eta_0 = 2041.288360 \text{ cm}^{-1}$. La fraction molaire de CO₂ est fixée à $\chi_{\text{CO}_2} = 0.1$, la pression à 1 atm et le profil de raie considéré est un profil de Voigt.

2.3.3 Des transitions énergétiques au spectre d'absorption

2.3.3.1 De la raie au spectre

Jusqu'alors, nous nous sommes concentrés sur une raie isolée. Cependant lorsque l'on étudie un gaz, celui-ci est le plus souvent composé de plusieurs espèces qui doivent être prises en compte. De surcroît, chaque molécule de chaque espèce occupe un état énergétique donné. Cela se traduit par un nombre très conséquent de transitions qui, elles aussi doivent être considérées. Il est alors courant de considérer le coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ - pour un nombre d'onde, des conditions thermodynamiques et un mélange donnés - comme la somme des participations $h_{a,i,\eta}(\mathbf{x}) = C_m(\mathbf{x})\sigma_{i,\eta}(\mathbf{x})$ de toutes les transitions $N_i(m)$ de toutes les espèces N_m du mélange (voir Fig. 2.16) :

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,i,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} C_m(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \sigma_{i,\eta}(\mathbf{x}) \quad (2.64)$$

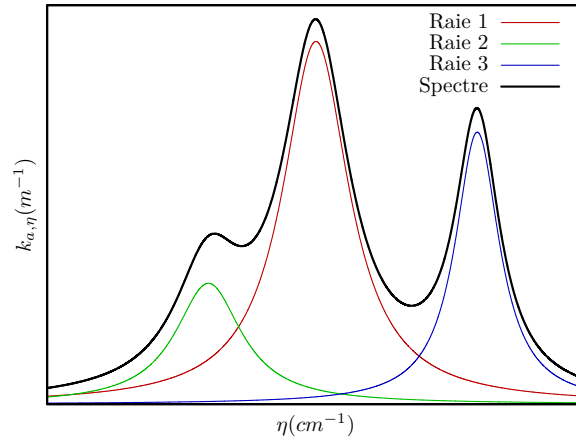


FIGURE 2.16 – Le spectre d'absorption est égal à la somme des participations de chaque raie en chaque nombre d'onde η .

La description du coefficient d'absorption comme la somme des participations de raies isolée constitue une hypothèse généralement raisonnable lorsqu'il s'agit de produire des spectres. Cette hypothèse sera d'ailleurs retenue tout au long de ce manuscrit. Cependant, en la posant, on omet en particulier de prendre en compte un effet appelé "Line Mixing" [Hartmann *et al.*, 2008]. En effet, des interactions entre deux transitions d'une même molécule peuvent avoir lieu par un transfert de population (on parle aussi d'échange d'intensité). C'est par exemple le cas lorsqu'un photon d'énergie $hc\eta$ sensé conduire, lors de son absorption par une molécule, à une transition donnée, mène en fait, à cause d'une légère variation de l'état énergétique de la molécule (causée par des collisions moléculaires) à une autre transition très proche de la première.

2.3.3.2 Bases de données spectroscopiques

Lors de l'étude du rayonnement en milieu participant, il est nécessaire de pouvoir caractériser en tout point et pour tout nombre d'onde les propriétés optiques du milieu et en particulier le coefficient d'absorption. On fait alors généralement appel aux spectres d'absorption, définis pour un mélange (espèces en présence, fractions molaires respectives) et un jeu de conditions thermodynamiques (pression, température). Toutefois, mis à part pour quelques configurations académiques homogènes, il est généralement nécessaire de recourir à un grand nombre de spectres pour couvrir les hétérogénéités de propriétés du milieu. Une production expérimentale de ces spectres serait une tâche très lourde et complexe qui devrait être renouvelée à chaque changement de cas d'étude ou d'hypothèses relatives au calcul du spectre (profil, élargissements, troncatures, *etc.*). Aussi, une large communauté de spectroscopistes s'attache, depuis plusieurs décennies à produire, pour différentes espèces moléculaires, des bases de données dites *de transitions* ou *spectroscopiques* (les principales bases de données sont citées dans la [Tab. 2.2](#)). Originellement, ces bases de données spectroscopiques ont été développées pour des applications atmosphériques [[McClatchey et al., 1973](#)] (HITRAN, GEISA, CDSD1000), et ont été étendues pour la gestion de configurations à hautes températures (CDSD-4000, Hitemp).

BDD + Version	Référence	Espèces	Gamme de T
CDSD-1000	[Tashkun et al., 2003]	CO ₂	$\lesssim 1000K$
CDSD-4000	[Tashkun et Perevalov, 2011]	CO ₂	$\lesssim 4000K$
Geisa 2011	[Jacquinet-Husson et al., 2011]	50 molécules	Basses températures
Hitemp	[Rothman et al., 2010]	CO ₂ , H ₂ O, CO, NO, OH	$\lesssim 1000K$
Hitemp 2010			$\lesssim 3000K$
Hitrان 2008	[Rothman et al., 2009]	42 molécules	Basses températures
Hitrان 2012	[Rothman et al., 2013]	47 molécules	

TABLE 2.2 – Principales bases données spectroscopiques fournies avec leur référence bibliographique et les espèces et gammes de températures d'application pour lesquelles elles sont établies.

Ces bases de données spectroscopiques recensent, pour un nombre conséquent de transitions énergétiques, quelques dizaines de paramètres¹⁰. Chaque jeu de paramètres permet alors de produire numériquement des raies d'absorption et ainsi des spectres [[Eymet, 2011b](#), [Eymet, 2013](#), [André et al., 2014](#)]. Outre certains paramètres quantiques ne rentrant pas directement en jeu dans la production de spectres, ces bases de données rassemblent pour chaque transition les paramètres suivants :

- m : Indice de la molécule
- i_{iso} : Indice de l'isotope
- η_0^v : Nombre d'onde central de la transition dans le vide (cm^{-1})
- S : Intensité de raie pour la température de référence ($cm^{-1}/(molecule\ cm^{-2})$)
- γ_{air} : Coefficient d'élargissement par collisions avec le reste du mélange (considéré comme de l'air) ($cm^{-1}atm^{-1}$)

10. L'ensemble des bases citées dans la [Tab. 2.2](#) ont adopté le même format de données, il est donc aisé dans des considérations informatiques de passer indifféremment de l'une à l'autre

- γ_{self} : Coefficient d'élargissement par collisions avec des molécules de l'espèce considérée ($cm^{-1}atm^{-1}$)
- E_{low} : Énergie du niveau bas de la transition (cm^{-1})
- n_{air} : Exposant de dépendance à la température de γ_{air} (–)
- n_{self} : Exposant de dépendance à la température de γ_{self} (–) (uniquement dans CDSD4000)
- δ_P : Coefficient de décalage induit par la pression ($cm^{-1}atm^{-1}$).

Toutefois, cette paramétrisation est très délicate. En effet, l'essentiel de ces paramètres est dépendant de la température, aussi chacune de ces bases de données est produite pour une température de référence $T_{ref} = 296K$, mis à part pour CDSD-1000 où $T_{ref} = 1000K$. De plus, la définition rigoureuse de la largeur d'une raie nécessite de connaître les fractions molaires de l'ensemble des espèces en présence pour quantifier les collisions inter-moléculaires conduisant à cet élargissement. Ne pouvant être représentatif de l'ensemble des mélanges gazeux, seules deux contributions à cet élargissement de raie sont fournies dans ces bases de données : celle due à l'espèce considérée (collisions entre molécules de la même espèce), et celle due aux collisions avec un mélange ayant la composition de l'air de l'atmosphère terrestre. Cela signifie donc que, dès lors que l'on s'éloignera de compositions proches de l'atmosphère terrestre, les spectres produits à partir de ces bases de données spectroscopiques seront plus ou moins biaisés.

Destinées originellement à l'étude de l'atmosphère terrestre, où les températures sont relativement faibles, ces bases de données ne recensaient que les paramètres des raies les plus intenses aux températures caractéristiques de leur objet d'application. Au cours du temps, avec des besoins croissants en termes de précision et de domaine d'application, ces bases de données n'ont cessé de s'enrichir, par l'introduction de raies de moins en moins intenses. Aujourd'hui les bases de données "basses températures" peuvent compter jusqu'à quelques millions de transitions pour une molécule unique.

Le besoin de bases de données pour décrire des applications "haute température" (notamment pour le domaine de la combustion) a également poussé la communauté de spectroscopistes à produire des bases de données encore plus importantes. En effet, comme présenté à la [Sec. 2.3.2.3](#), la température "active" un grand nombre de raies qui étaient jusqu'alors imperceptibles à faible température (voir [Fig. 2.17](#)). Ces nouvelles bases de données (CDSD, Hitemp) répertorient ainsi un nombre considérable de transitions susceptibles d'être sensibles à haute température (la base de données CDSD-4000 rassemble pour la seule molécule de CO_2 les paramètres de plus de 600 millions de raies pour un volume de données approchant les 80Go).

2.3.3.3 Production de spectres d'absorption haute-résolution

À partir de l'[Eq. 2.64](#) et des paramètres contenus dans les bases de données spectroscopiques, il est alors possible de calculer le coefficient d'absorption pour un nombre d'onde, une température, une pression et une fraction molaire donnés (dans

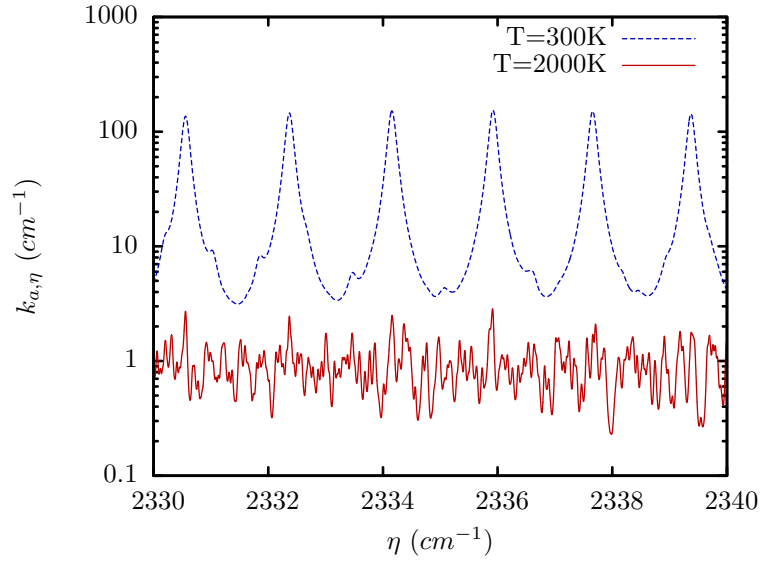


FIGURE 2.17 – Spectres d'absorption d'un mélange de gaz (5% de CO_2 et 95% de N_2) à pression atmosphérique pour deux températures différentes : $T = 300\text{K}$ et $T = 2000\text{K}$. Le spectre à haute température présente un nombre beaucoup plus élevé de raies significatives.

la limite de validité de la base de données). Celui-ci s'exprime comme :

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} C_m(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} S_i(\mathbf{x}) f_i(\eta, \mathbf{x}) \quad (2.65)$$

L'intensité de la raie i est donnée par :

$$S_i(\mathbf{x}) = S(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T(\mathbf{x}))} \frac{\exp\left(-\frac{C_2 E_{low}}{T(\mathbf{x})}\right) 1 - \exp\left(-\frac{C_2 \eta_0}{T(\mathbf{x})}\right)}{\exp\left(-\frac{C_2 E_{low}}{T_{ref}}\right) 1 - \exp\left(-\frac{C_2 \eta_0}{T_{ref}}\right)} \quad (2.66)$$

où $c_2 = 100hc_0/k_B \approx 1.4388\text{K.cm}$ et où $Q(T)$ est la fonction de partition de l'isotope de l'espèce considérée à la température d'intérêt T . Ces fonctions de partitions peuvent être obtenues à partir de modèles quantiques analytiques de type oscillateurs harmoniques [André *et al.*, 2014], ou à partir de tabulations et d'un schéma d'interpolation. Au cours de ces travaux, nous utiliserons les tabulations publiées dans [Fischer *et al.*, 2003] (distribuées avec la base de données Hitran) en utilisant une interpolation Lagrangienne du troisième degré.

Concernant le profil de raie, les deux choix communs sont les profils de Lorentz ou de Voigt. Dans les deux cas le nombre d'onde de centre de raie est donné par

$$\eta_0 = \eta_0^v + \delta_P \times P \quad (2.67)$$

Pour un nombre d'onde η la valeur du profil de Lorentz est donnée par

$$f_{i,L}(\eta, \mathbf{x}) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{L,\eta}(\mathbf{x})}{\gamma_{L,\eta}(\mathbf{x})^2 + (\eta - \eta_0)^2} \quad (2.68)$$

où $\gamma_{L,\eta}(\mathbf{x})$ est la demi-largeur à mi-hauteur du profil de Lorentz que l'on obtient à partir des paramètres contenus dans les bases spectroscopiques par :

$$\gamma_{L,\eta}(\mathbf{x}) = \left(\frac{T_{ref}}{T(\mathbf{x})} \right)^{n_{air}} [\gamma_{self} P_s + \gamma_{air} (P - P_s)] \quad (2.69)$$

La valeur du profil de Voigt est, quant à elle, plus difficile à calculer d'un point de vue numérique car non analytique. En effet, il s'agit d'un produit de convolution d'un profil de Lorentz et d'un profil de Doppler. Nous avons fait ici le choix de recourir à l'algorithme d'Humlicek [Humlicek, 1982] qui présente l'avantage de maîtriser l'erreur numérique commise. Cette routine nécessite en plus de la demi-largeur du profil de Lorentz, la demi-largeur du profil de Doppler, donnée par :

$$\gamma_{D,\eta}(\mathbf{x}) = \frac{\eta_0}{c_0} \sqrt{\frac{2 \ln(2) k_B T(\mathbf{x})}{M}} \quad (2.70)$$

où M est la masse molaire de l'isotope considéré.

La production de spectres d'absorption à partir de bases de données spectroscopiques demeure tout de même une tâche fastidieuse. En effet, pour une résolution spectrale déterminée, l'ensemble des contributions de chaque transition $S_i(\mathbf{x}) f_{\eta,i}(\mathbf{x})$ doit être calculé. En pratique pour des cas à pression atmosphérique, la résolution communément admise pour décrire correctement la variation spectrale du coefficient d'absorption est de 10^{-2}cm^{-1} soit près de dix millions de points pour couvrir entièrement la gamme spectrale du rayonnement thermique (un exemple de spectre haute résolution est donné à la Fig. 2.18). Pour des pressions plus faibles, il est courant de descendre à une résolution inférieure à 10^{-5}cm^{-1} . Une telle production de spectres et l'étude radiative qui s'y appuie sont connues sous le nom d'approche *raie par raie* (ou *LBL*, pour *line-by-line*) et fait office de solution de référence. Pour alléger ce coûteux processus, il est alors courant de recourir à plusieurs hypothèses simplificatrices :

- Sélectionner uniquement les raies les plus intenses dans les gammes de températures d'étude. Les seuils minimum d'intensité pour une température donnée sont généralement de l'ordre de $3 \cdot 10^{-27} \text{cm/molecule}$ voire de $3 \cdot 10^{-29} \text{cm/molecule}$ [Rothman et al., 2013].
- La seconde méthode consiste à considérer que les raies n'apportent une contribution au coefficient d'absorption que pour des nombres d'onde proches de celui du centre de raie. Ainsi, les ailes de raie au-delà d'une certaine distance (généralement 25cm^{-1}) sont tronquées : $h_{a,|\eta-\eta_0|>0} = 0 \text{cm}^{-1}$. Une telle approche peut alléger considérablement les temps de calcul puisque pour un nombre d'onde η d'intérêt, seules les raies centrées dans l'intervalle $[\eta - 25, \eta + 25]$ sont prises en compte. Cette approche, connue sous le nom de *troncature de raie*,

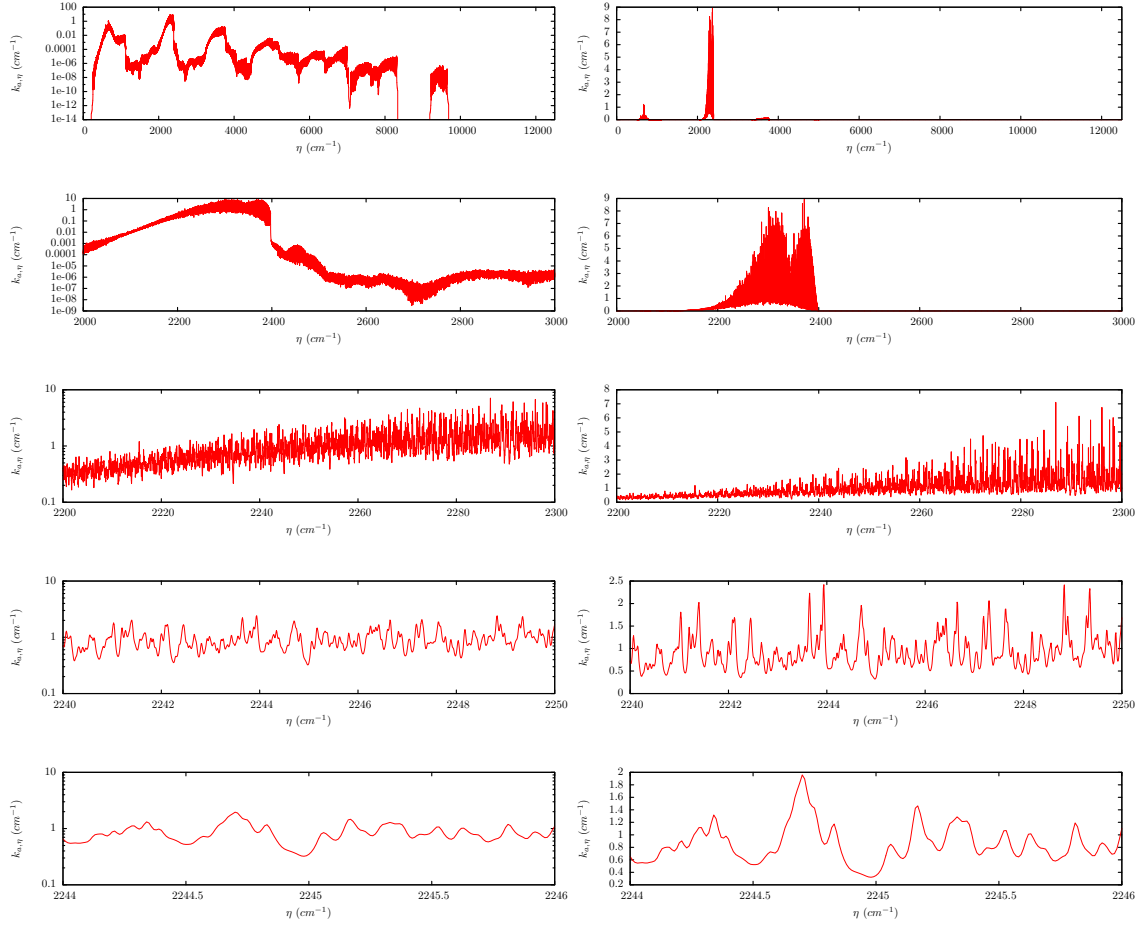


FIGURE 2.18 – Spectres d'absorption définis à haute résolution pour différents intervalles spectraux (à gauche les échelles sont logarithmiques et à droite linéaires). Le mélange gazeux considéré est composé de 50% de CO_2 et de 50% de N_2 à une température de 1500K et une pression de 1atm. Les calculs ont été réalisés à partir de la base de données *CDSD-4000* (628 064 550 transitions) avec une troncature d'aile de raie à 25cm^{-1} et en considérant des profils de raie Lorentzien.

est en partie justifiée par le fait que les profils standards de raie (de Voigt et Lorentz) sont peu représentatifs au niveau des ailes de raie lointaines.

- Enfin, en plus d'être coûteux à produire, ces spectres présentent le désavantage d'être complexes à gérer lors de calculs radiatifs du fait de l'importante variation spectrale du coefficient d'absorption. Aussi, depuis près d'un siècle, un grand nombre de modèles dégradés de spectres (analytiques, statistiques...) ont été développés pour répondre à ce défaut. Ne faisant pas l'objet des travaux présentés dans ce manuscrit, ces modèles approchés ne seront pas détaillés. De plus amples informations concernant ces modèles peuvent être trouvés dans [Goody et Yung, 1996, Taine et Soufiani, 1999, Siegel *et al.*, 2011, Modest, 2013, André *et al.*, 2014].

Différents codes de calculs sont disponibles pour la production de tels spectres d'absorption, parmi lesquels on peut citer deux codes exécutables directement via une interface web "Information-calculating system Spectroscopy of Atmospheric Gases" [Semiletova, 2005] (<http://spectra.iao.ru/>) et "Hitran on the Web" [Rothman *et al.*, 2013] (<http://hitran.iao.ru/>) ou encore le code Kspectrum [Eymet, 2011b] (<http://meso-star.com/>) développé par V. Eymet qui présente l'avantage de pouvoir maîtriser les erreurs d'interpolation spectrale grâce à un maillage à pas adaptatif.

Résumé du chapitre

Ce chapitre a eu pour but de rappeler des éléments essentiels de la physique du transfert radiatif en milieu gazeux qui vont être utilisés dans la suite du manuscrit. La luminance, grandeur de base du rayonnement a été présentée et placée dans sa description mésoscopique, permettant d'approcher le transfert radiatif dans des considérations statistiques propres à la physique du transport corpusculaire. Les différentes interactions entre rayonnement et gaz ont également été présentées et l'équation du transfert radiatif, cas particulier des équations de Boltzmann, a été établie sous ses formulations locale (ou différentielle) et intégrale. Enfin, une partie a été consacrée aux mécanismes d'absorption et d'émission de rayonnement par la matière, introduisant ainsi les notions de transitions moléculaires, de coefficients d'absorption et de spectres d'absorption. Un accent particulier a été mis sur les différentes dépendances du coefficient d'absorption (à la pression, température, composition chimique et au nombre d'onde) qui occuperont une place importante dans les chapitres qui vont suivre.

CHAPITRE 3

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

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

Introduction

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

spectrale de la luminance.

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

3.1 Rappels statistiques

3.1.1 Variables aléatoires et probabilités

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

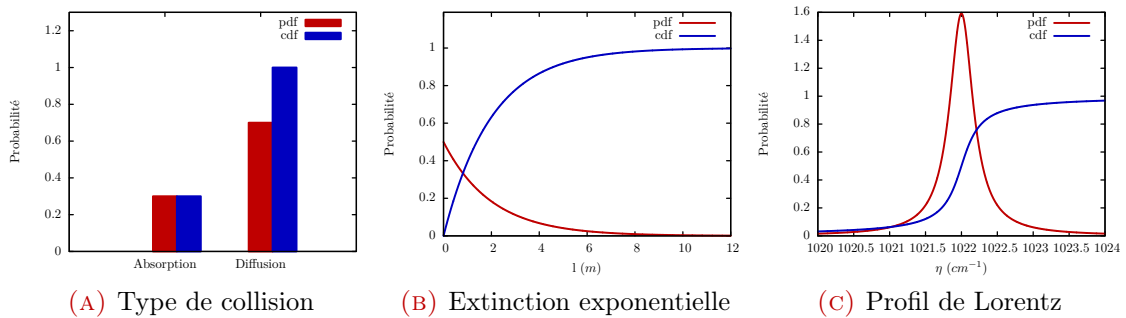


FIGURE 3.1 – Exemples de probabilités discrètes, de densités de probabilité (pdf) et de fonctions de répartition (cdf) couramment rencontrées en transfert radiatif. La figure (A) illustre les albédos d'absorption et de diffusion simple assimilables aux probabilités qu'un photon d'être soit absorbé, soit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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

NOTE : Caractère linéaire et projectif de l'espérance

Considérons la grandeur intégrale A définie par :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

et

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2 Introduction aux méthodes de Monte-Carlo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

EXEMPLE : Méthodes de Monte-Carlo pour une observable statistique

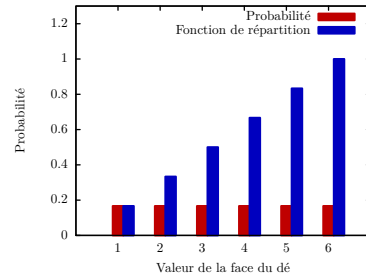
Lancer de dé. Attachons-nous à estimer par un algorithme de Monte-Carlo l'espérance de la valeur obtenue Y lors d'un lancer de dé. Le modèle posé admet que la probabilité que le dé tombe sur n'importe laquelle de ses 6 faces m est identique : $\mathcal{P}_Y(y_m) = 1/6$ (hypothèse d'équiprobabilité, voir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

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

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

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

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

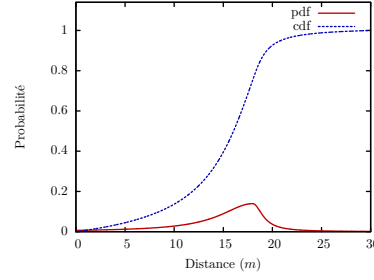


Lanceur de poids. Pour illustrer le cas d'une variable aléatoire continue, considérons désormais l'espérance de la distance X à laquelle un lanceur de poids jette son projectile. Supposons également que ce sportif soit très constant et qu'un modèle probabiliste de X ait été fait : la variable X est décrite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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

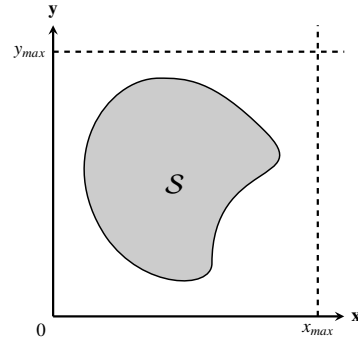
N_{mc} d'échantillons b_i de la variable aléatoire B selon $p_B(b)$ et à calculer les poids de Monte-Carlo $f(b_i)/p_B(b_i)$ correspondants. Une estimation de la grandeur A est alors donnée par :

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

EXEMPLE : Méthodes de Monte-Carlo pour une observable déterministe

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

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



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

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

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

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

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

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

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

3.2.2 Estimation de l'erreur statistique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2.3 Les méthodes de Monte-Carlo en pratique

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

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

3.2.3.1 Échantillonnage

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

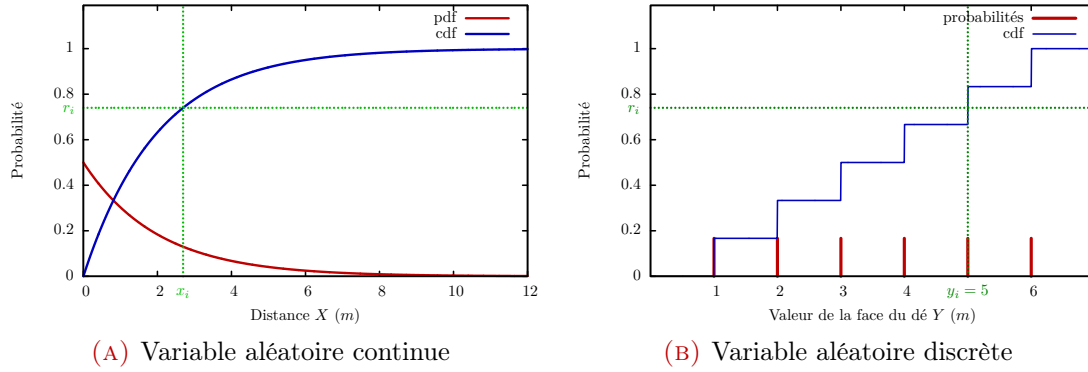


FIGURE 3.2 – Procédure d'échantillonnage d'une variable aléatoire continue X (A) et discrète Y (B). L'échantillonnage de x_i et y_i consiste à générer de façon aléatoire et uniforme un nombre r_i et d'inverser la fonction de répartition de la variable aléatoire d'intérêt.

3.2.3.2 Précision et qualité des résultats

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

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

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

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

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

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

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

EXEMPLE : Événements rares

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2.3.3 Techniques de réduction de variance

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

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

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

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

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

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

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

obtenue par le nouvel algorithme de Monte-Carlo.

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

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

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

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

3.3 Étude de la luminance dans un milieu purement absorbant

Le développement de méthodes de Monte-Carlo appliquées à des problématiques de transfert radiatif date des années 1960 avec les travaux de J.R. Howell et de M. Perlmutter [Howell et Perlmutter, 1964a, Howell et Perlmutter, 1964b, Perlmutter et Howell, 1964, Howell, 1969]. Bénéficiant des progrès méthodologiques et informatiques, elles sont aujourd'hui bien maîtrisées dans les applications ayant trait au rayonnement thermique dans les milieux participants [Farmer et Howell, 1998, Howell, 1998, Modest, 2003b] où elles occupent le rôle de méthodes de référence et de validation.

Plutôt que de poursuivre la présentation des méthodes de Monte-Carlo en toute généralité, nous allons désormais les appliquer à des problématiques radiatives en présence de milieu participant. Le cas d'étude, simple au début, sera progressivement complexifié dans le but d'introduire les différentes techniques et approches qui seront utilisées dans la suite de ce manuscrit.

Pour commencer, plaçons-nous dans le cas particulier d'un milieu semi-transparent purement absorbant (les phénomènes de diffusion sont négligés). Puisque dans une telle configuration, le rayonnement ne se propage qu'en ligne droite jusqu'à ce qu'il soit absorbé, il est possible de ramener ce problème à un cas monodimensionnel. L'équation du transfert radiatif en régime stationnaire est alors donnée par :

$$\frac{dL_\eta(x, u)}{dx} = k_{a,\eta}(x) [L_\eta^{eq}(x, u) - L_\eta(x, u)] \quad (3.46)$$

3.3.1 Luminance dans un milieu infini, purement absorbant

Considérons dans un premier temps ce milieu absorbant comme infini et étudions la luminance en un point et dans une direction donnés (voir Fig. 3.3). La luminance au point x_0 dans la direction u_0 correspond alors à l'intégrale spatiale sur le chemin $]-\infty, x_0]$ d'un terme d'émission $k_{a,\eta}(x)L_\eta^{eq}(x)dx$ atténué selon la loi de Beer-Lambert entre x et x_0 d'un facteur $\exp\left(-\int_x^{x_0} k_{a,\eta}(x')dx'\right)$:

$$L_\eta(x_0, u_0) = \int_{-\infty}^{x_0} dx k_{a,\eta}(x) L_\eta^{eq}(x) \exp\left(-\int_x^{x_0} k_{a,\eta}(x')dx'\right) \quad (3.47)$$

Comme introduit à la Sec. 2.2.4.2, il est possible de penser l'extinction exponentielle comme une densité de probabilité et ainsi d'exprimer statistiquement $L_\eta(x_0, u_0)$:

$$L_\eta(x_0, u_0) = \int_{-\infty}^{x_0} dx p_X(x) L_\eta^{eq}(x) \quad (3.48)$$

où $p_X(x) = k_{a,\eta}(x) \exp\left(-\int_x^{x_0} k_{a,\eta}(x')dx'\right)$ est la fonction densité de probabilité caractéristique de la loi de Beer-Lambert (exprimée ici en position plutôt qu'en libre

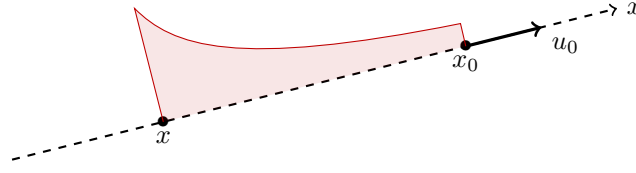


FIGURE 3.3 – Milieu infini, monodimensionnel et purement absorbant. La luminance au point x_0 dans la direction u_0 est égale à l'intégrale spatiale sur le chemin $]-\infty, x_0]$ d'un terme d'émission atténué selon la loi de Beer-Lambert entre les points d'émission x et d'intérêt x_0 .

parcours).

La luminance $L_\eta(x_0, u_0)$ correspond alors à l'espérance de la variable aléatoire $W(X) = L_\eta^{eq}(X)$:

$$L_\eta(x_0, u_0) = \mathbb{E}(W(X)) = \mathbb{E}(L_\eta^{eq}(X)) \quad (3.49)$$

où X est la variable aléatoire associée aux positions d'émission. Cette équation illustre simplement le fait que la luminance en x_0 est définie comme la moyenne pondérée par la loi de Beer-Lambert des luminances d'équilibre de tous les points se situant sur la demi-droite $]-\infty, x_0]$ définie par rapport à u_0 .

Réaliser un algorithme de Monte-Carlo pour ce problème revient donc à échantillonner la variable aléatoire poids $W(X) = L_\eta^{eq}(X)$ et donc à réaliser un nombre important N_{mc} de réalisations indépendantes (indiquées i), chacune composée des étapes suivantes :

ALGORITHME

1. On échantillonne de façon indépendante une position d'émission x_i selon la fonction densité de probabilité $p_X(x)$. Cela consiste à échantillonner un nombre aléatoire r_i entre 0 et 1 de façon uniforme et à résoudre l'équation $r_i = \int_{-\infty}^{x_i} p_X(x) dx$. Dans le cas où le coefficient d'absorption est homogène, la position de collision est donnée par $x_i = x_0 + \ln(r_i)/k_{a,\eta}$.
2. On calcule la luminance d'équilibre au point x_i : $w_i = L_\eta^{eq}(x_i)$ qui correspond alors à un échantillon de la variable aléatoire poids : $W(X)$.

Une estimation non biaisée $\tilde{L}_\eta(x_0, u_0)$ de la luminance par cet algorithme de Monte-Carlo est alors donnée par la moyenne arithmétique des échantillons w_i de la variable aléatoire $W(X)$: $\tilde{L}_\eta(x_0, u_0) = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i$. Il est également possible de calculer l'écart-type d'échantillon $s(\tilde{L}_\eta(x_0, u_0))$ et d'autres indicateurs statistiques comme ceux présentés à la [Sec. 3.2.3.2](#).

Nous nous sommes volontairement placés ici dans un formalisme monodimensionnel pour des motivations de didactique et de légèreté d'écriture. Toutefois, dans la perspective de traiter des problèmes multidimensionnels, il est possible de généraliser ce formalisme en faisant intervenir l'idée de libre parcours d'absorption, noté ici l .

Les positions \mathbf{x} et les directions \mathbf{u} deviennent ainsi des grandeurs vectorielles. La formulation intégrale de la luminance s'écrit alors :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} dl k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) dl'\right) \quad (3.50)$$

On utilisera souvent une forme plus compacte en introduisant $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0$:

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} dl k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) dl'\right) \quad (3.51)$$

qu'il est possible de reformuler statistiquement en

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l) dl L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \quad (3.52)$$

La luminance est donc désormais décrite comme l'espérance de la luminance d'équilibre au point d'émission $\mathbf{X}_1 = \mathbf{x}_0 - \mathcal{L}\mathbf{u}_0$, fonction de la variable aléatoire \mathcal{L} dont la fonction densité de probabilité est $p_{\mathcal{L}}(l) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) dl'\right)$:

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0 - \mathcal{L}\mathbf{u}_0)] = \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{X}_1)] \quad (3.53)$$

3.3.2 Approche analogue et réciprocité des chemins

L'algorithme de Monte-Carlo proposé précédemment a été établi à partir d'une formulation statistique de l'équation intégrale du transfert radiatif. Cependant, lorsqu'il s'agit de développer des méthodes de Monte-Carlo, il est courant de rencontrer une autre pratique qui s'appuie presque exclusivement sur des images tirées de la physique du transport. On parle de *méthodes de Monte-Carlo analogues*. Cette approche consiste à réaliser numériquement et stochastiquement les expériences physiques que subissent les corpuscules d'intérêt à partir de leurs lois de probabilité, supposées connues. Dans le cas du transfert radiatif, cela signifie que l'on va "lancer" un grand nombre N_{mc} de photons [Starwest, 2014b] ou de "paquets de photons" [Modest, 2013] selon des lois d'émission et suivre leurs interactions avec le milieu et les frontières.

Pour appliquer une telle approche au cas d'étude de la section précédente, il convient de s'attarder sur la notion de réciprocité des chemins optiques [Case, 1957] qui joue un rôle important lorsqu'il s'agit de construire des images physiques associées. Cette réciprocité des chemins, faisant appel aux notions de micro-réversibilité, est une condition nécessaire pour garantir le second principe de la thermodynamique. Cela implique au régime stationnaire, qu'un photon dans la direction \mathbf{u}_1 en \mathbf{x}_1 a la même probabilité d'atteindre le point \mathbf{x}_2 dans la direction \mathbf{u}_2 que celle qu'un photon partant de \mathbf{x}_2 dans la direction $-\mathbf{u}_2$ atteignent le point \mathbf{x}_1 dans la direction $-\mathbf{u}_1$. En d'autres termes, il est possible de "lancer" des photons depuis le point sonde d'intérêt (en le considérant mentalement comme point d'émission) jusqu'à ce qu'ils soient absorbés par le milieu. Ces points d'absorption correspondent alors

aux points d'émission du modèle direct. Dans le cas d'un milieu infini, purement absorbant, l'intérêt de la réciprocité des chemins reste limité. Ce ne sera que lorsque des phénomènes de diffusions ou de réflexions multiples seront pris en compte que cette notion de réciprocité prendra tout son sens.

Il est donc possible de développer un algorithme de Monte-Carlo en s'appuyant uniquement sur la physique du rayonnement, sur les images qu'elle véhicule et sur ce principe de réciprocité. Pour le cas introduit à la [Sec. 3.3](#) dans lequel on souhaite estimer $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, cela consiste à émettre un grand nombre de photons depuis le point \mathbf{x}_0 dans la direction $-\mathbf{u}_0$ et à échantillonner un libre parcours selon la loi de Beer-Lambert conduisant à une position d'absorption \mathbf{x}_1 , interprétée comme la position réelle d'émission. L'estimation de la luminance est alors donnée comme la moyenne d'échantillon de $L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1)$ pour l'ensemble des photons tirés. Un tel algorithme correspond parfaitement à l'algorithme présenté à la section précédente. On trouve dans la littérature internationale ce type d'algorithmes qualifié de *backward* ou *reverse* [[Walters et Buckius, 1992](#), [Walters et Buckius, 1994](#), [Modest, 2003a](#), [Siegel et al., 2011](#)] que nous traduirons ici par *Monte-Carlo réciproque*.

Dans le cas de l'estimation de la luminance pour une configuration multidimensionnelle, il est nécessaire de recourir à la réciprocité des chemins pour la construction d'images physiques. En effet, si l'on suivait une approche directe, la probabilité qu'un photon passe par le point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 serait nulle, du fait de la ponctualité du point et de la direction d'intérêt. Cependant, pour l'étude de grandeurs intégrées sur l'espace des phases (*ex* : la puissance radiative absorbée par un élément de surface sur tout l'hémisphère entrant), une vision réciproque n'est plus nécessaire puisque la probabilité qu'un photon soit absorbé par cette surface n'est plus nulle. Toutefois, même dans ces cas, il peut être courant de faire appel au caractère réciproque du rayonnement pour réduire la variance et ainsi les temps de calcul associés par une *reformulation intégrale*. Il suffit d'imaginer une surface très grande S_g émettant vers une surface S_p très petite devant S_g et de considérer la puissance absorbée par S_p . Lancer des photons de S_g en espérant qu'ils soient absorbés par S_p peut être très coûteux en temps de calcul. En effet, un grand nombre de photons émis n'atteindront jamais la petite surface. Au contraire, il semble plus judicieux d'utiliser la réciprocité des chemins : la grande majorité des photons "émis" par S_p seront "absorbés" par la grande surface. On aura par ce biais, en quelque sorte, sélectionné préférentiellement les chemins optiques dignes d'intérêt par une *reformulation intégrale*, réduisant ainsi la variance de l'estimation de cette puissance.

Dans ce manuscrit, nous faisons le choix de privilégier le développement de méthodes de Monte-Carlo à partir des formulations intégrales et statistiques, qui offrent à nos yeux, les plus grandes libertés d'amélioration. Toutefois, ne pouvant pas nous passer d'images physiques pour accréditer nos propositions, ce ne sera qu'a posteriori que nous ferons appel à cette vision analogue. Celle-ci ne conditionnera pas, à proprement parler, le développement des méthodes, mais offrira les images

nécessaires à une bonne analyse des phénomènes en présence et un retour intéressant sur nos propositions méthodologiques.

3.3.3 Prise en compte des frontières du milieu

Considérons à nouveau le cas d'étude introduit à la [Sec. 3.3.1](#) auquel est rajoutée en x_w une paroi noire. Les photons peuvent donc désormais être émis par le milieu mais aussi par la paroi (voir [Fig. 3.4](#)). La luminance $L_\eta(x_0, u_0)$ est donc la somme de la luminance d'équilibre émise par la paroi atténuée exponentiellement sur le chemin $[x_w, x_0]$ et d'un terme source d'émission du milieu atténué lui aussi exponentiellement et intégré entre x_w et x_0 :

$$L_\eta(x_0, u_0) = L_\eta^{eq}(x_w) \exp\left(-\int_{x_w}^{x_0} k_{a,\eta}(x') dx'\right) + \int_{x_w}^{x_0} dx k_{a,\eta}(x) L_\eta^{eq}(x) \exp\left(-\int_x^{x_0} k_{a,\eta}(x') dx'\right) \quad (3.54)$$

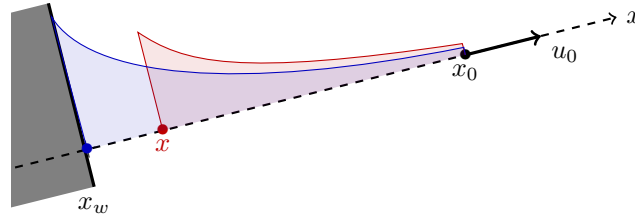


FIGURE 3.4 – Milieu fini, monodimensionnel et purement absorbant. Une paroi noire est placée en x_w . La luminance au point x_0 dans la direction u est égale à la somme d'un terme d'émission à la paroi et d'un terme source d'émission du milieu. Chacun d'entre-eux faisant intervenir une atténuation exponentielle.

L'[Eq. 3.54](#) peut alors être reformulée :

$$L_\eta(x_0, u_0) = \int_{-\infty}^{x_0} dx k_{a,\eta}(x) \exp\left(-\int_x^{x_0} k_{a,\eta}(x') dx'\right) \times [\mathcal{H}(x_w - x) L_\eta^{eq}(x_w) + \mathcal{H}(x - x_w) L_\eta^{eq}(x)] \quad (3.55)$$

où $\mathcal{H}(a)$ est la fonction de Heaviside, valant 0 si $a < 0$ et 1 si $a > 0$. Cette reformulation revient donc à considérer la paroi comme un milieu semi-transparent infini, purement absorbant, de température uniforme $T = T(x_w)$. Une telle expression est souvent rencontrée en transfert radiatif et présente l'avantage d'être plus facilement manipulable (statistiquement et algorithmiquement) que l'[Eq. 3.54](#). Elle requiert cependant une information sans réel sens : le champ de coefficient d'absorption doit être défini sur $] -\infty; x_0]$ et a fortiori derrière la paroi. Dans la pratique, on définit généralement le coefficient d'absorption comme égal à $k_{a,\eta}(x_w^+)$ pour $x \leq x_w$, mais en théorie tout champ strictement positif peut être accepté.

De la même façon que précédemment, l'atténuation exponentielle peut être

exprimée comme une fonction densité de probabilité. Il vient alors :

$$L_\eta(x_0, u_0) = \int_{-\infty}^{x_0} p_X(x) dx \left[\mathcal{H}(x - x_w) L_\eta^{eq}(x) + \mathcal{H}(x_w - x) L_\eta^{eq}(x_w) \right] \quad (3.56)$$

qui à son tour peut être exprimée sous la forme d'une espérance

$$L_\eta(x_0, u_0) = \mathbb{E} \left[\mathcal{H}(X - x_w) L_\eta^{eq}(X) + \mathcal{H}(x_w - X) L_\eta^{eq}(x_w) \right] = \mathbb{E} [W(X)] \quad (3.57)$$

En définissant X^* comme une variable aléatoire valant X si $X > x_w$ et valant x_w autrement, on obtient

$$L_\eta(x_0, u_0) = \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(X^*)] = \mathbb{E} [W(X^*)] \quad (3.58)$$

Il est alors possible d'estimer $L_\eta(x_0, u_0)$ par un algorithme de Monte-Carlo. Celui-ci consistera à opérer un nombre important N_{mc} de réalisations (indicées i), chacune composée des deux étapes suivantes :

ALGORITHME

1. On échantillonne une position d'émission x_i à partir de la fonction densité de probabilité $p_X(x)$.
2. Si la position échantillonnée est dans le milieu participant : $x_i \in [x_w, x_0]$ alors l'échantillon de la variable aléatoire $W(X)$ est $w_i = L_\eta^{eq}(x)$. Au contraire si x_i est au-delà de la frontière : $x_i < x_w$, l'échantillon est défini comme $w_i = L_\eta^{eq}(x_w)$.

Les images physiques correspondantes sont celles de photons suivis depuis x_0 dans la direction $-u_0$, jusqu'à ce qu'ils soient absorbés entre x_0 et $-\infty$ par le milieu ou par la paroi considérée alors comme un milieu infini purement absorbant et isotherme.

3.3.4 Échantillonnage préférentiel et approche par variance nulle

3.3.4.1 Échantillonnage préférentiel

Il est fréquent, notamment dans des applications de type combustion, de considérer en première approximation que les parois ont une température fixée à $0K$. En d'autres termes, cela consiste à admettre que les parois absorbent mais n'émettent pas de rayonnement : $L_\eta^{eq}(x_w) = 0$. Il peut alors être intéressant, dans une optique de réduction de variance, d'échantillonner les positions d'absorption dans le seul intervalle $[x_w, x_0]$ et non sur $]-\infty, x_0]$. Cette approche d'échantillonnage préférentiel consiste alors à définir sur $[x_w, x_0]$ une nouvelle densité de probabilité associée aux positions d'émission $\tilde{p}_X(x)$. L'Eq. 3.56 est alors reformulée comme :

$$L_\eta(x_0, u_0) = \int_{x_w}^{x_0} \tilde{p}_X(x) dx \left[\frac{p_X(x)}{\tilde{p}_X(x)} L_\eta^{eq}(x) \right] = \mathbb{E} \left[\frac{p_X(X)}{\tilde{p}_X(X)} L_\eta^{eq}(X) \right] = \mathbb{E} [\tilde{W}(X)] \quad (3.59)$$

Les fonctions de Heaviside ont pu être supprimées (avec un changement du domaine d'intégration), puisque l'émission de la paroi est nulle. En faisant intervenir la densité de probabilité $\tilde{p}_X(x)$ on modifie artificiellement la statistique de notre problème. Ce biais est alors compensé par une modification de la variable aléatoire poids qui devient $\tilde{W}(X) = \frac{p_X(X)}{\tilde{p}_X(X)} L_\eta^{eq}(X)$.

Jusqu'ici aucune expression n'a été proposée concernant cette nouvelle densité de probabilité. Ce choix est en effet totalement arbitraire. Une proposition assez simple consiste à normaliser la densité de probabilité originelle $p_X(x)$ sur le segment $[x_w, x_0]$:

$$\tilde{p}_X(x) = \frac{\exp\left(-\int_{x_w}^{x_0} k_{a,\eta}(x') dx'\right)}{\int_{x_w}^{x_0} \exp\left(-\int_{x_w}^{x_0} k_{a,\eta}(x') dx'\right)} \quad (3.60)$$

Cet échantillonnage préférentiel n'induit aucun changement quant à la structure algorithmique : un grand nombre N_{mc} de positions d'émission x_i seront échantillonnées selon $\tilde{p}_X(x)$ (qui ne correspond alors plus à la loi de Beer-Lambert). Une fois cette position d'émission connue, le poids $\tilde{w}_i(x_i) = \frac{p_X(x_i)}{\tilde{p}_X(x_i)} L_\eta^{eq}(x_i)$ sera calculé. L'estimation de $L_\eta(x_0, u_0)$ par l'algorithme de Monte-Carlo sera alors donnée par la moyenne arithmétique des N_{mc} échantillons \tilde{w}_i .

3.3.4.2 Approche par variance nulle

Il est également possible d'appuyer le choix de $\tilde{p}_X(x)$ avec une approche par variance nulle. Cela consiste à exprimer la fonction densité de probabilité $\tilde{p}_{X,\emptyset}(x)$ idéale qui validerait $L_\eta(x_0, u_0) = \tilde{W}_\emptyset(X)$ quelle que soit la valeur prise par X . La variable aléatoire $\tilde{W}_\emptyset(X) = \frac{p_X(X)}{\tilde{p}_{X,\emptyset}(X)} L_\eta^{eq}(X)$ aurait alors une variance nulle. Dans le cas considéré (température de paroi nulle), cette densité de probabilité idéale serait donnée par :

$$\tilde{p}_{X,\emptyset}(x) = \frac{p_X(x) L_\eta^{eq}(x)}{L_\eta(x_0, u_0)} = \frac{p_X(x) L_\eta^{eq}(x)}{\int_{x_w}^{x_0} p_X(x') L_\eta^{eq}(x') dx'} \quad (3.61)$$

Il est évident que nous ne sommes pas capables de calculer cette fonction idéale, puisqu'elle dépend de $L_\eta(x_0, u_0)$ qui est justement l'observable que nous souhaitons estimer. Cependant, s'il est possible d'établir un modèle approché $y(x)$ de $p_X(x) L_\eta^{eq}(x)$ suffisamment fidèle au modèle physique d'intérêt, et dont l'intégrale entre x_w et x_0 est analytiquement calculable, la fonction densité de probabilité

$$\tilde{p}_X(x) = \frac{y(x)}{\int_{x_w}^{x_0} y(x) dx} \quad (3.62)$$

sera proche de $\tilde{p}_{X,\emptyset}(x)$. Ainsi, bien que non nulle, la variance de $\tilde{W}(X)$ aura été sensiblement réduite⁴, ce qui se traduira en pratique par une diminution du nombre de réalisations nécessaires pour parvenir à une même erreur relative. Toute la difficulté

4. Il peut arriver que le choix de $y(x)$ soit à l'origine d'une augmentation de variance, traduisant ainsi une mauvaise représentation de la physique d'intérêt.

de l'approche par variance nulle réside donc dans l'établissement du modèle utilisé pour approcher au mieux $\tilde{p}_{X,\emptyset}(x)$. Une approche par variance nulle sera réalisée au [Chap. 5](#) pour orienter les choix arbitraires de plusieurs densités de probabilités et probabilités discrètes.

3.4 Étude de la luminance dans un milieu absorbant et diffusant

L'étude d'un milieu purement absorbant a donc permis d'aborder les méthodes de Monte-Carlo réciproques et analogues ainsi que les approches d'échantillonnage préférentiel et par variance nulle. Complexifions désormais ce cas d'étude en rajoutant des phénomènes de diffusions multiples qui vont engendrer une récursivité dans le formalisme statistique et les algorithmes de Monte-Carlo correspondants. L'équation stationnaire du transfert radiatif, relative à de telles considérations, est rappelée ci-dessous :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = -k_\eta(\mathbf{x})L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + k_{a,\eta}(\mathbf{x})L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}|\mathbf{u}')L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}')d\mathbf{u}' \quad (3.63)$$

où $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}|\mathbf{u}')$ est la fonction de phase et $k_\eta(\mathbf{x}) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x})$ est le coefficient d'extinction au point \mathbf{x} .

3.4.1 Luminance dans un milieu absorbant, diffusant, infini

Concentrons-nous tout d'abord sur un milieu tridimensionnel, infini, absorbant, émettant et diffusant le rayonnement. La luminance au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 est égale à la somme d'une infinité de composantes C_j , atténuées exponentiellement le long de leur chemin de diffusion entre leur position d'émission et le point sonde \mathbf{x}_0 :

- C_1 : la luminance associée aux photons émis en \mathbf{x}_1 dans la direction \mathbf{u}_0 et atteignant directement la position \mathbf{x}_0 sans avoir subi d'événement de diffusion (voir [Fig. 3.5a](#)).
- C_2 : la luminance associée aux photons émis en tout point \mathbf{x}_2 de l'espace dans une direction \mathbf{u}_1 qui atteignent le point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 en ayant subi une unique diffusion en \mathbf{x}_1 (voir [Fig. 3.5b](#)).
- C_3 : la luminance associée aux photons émis en tout point \mathbf{x}_3 de l'espace dans une direction \mathbf{u}_2 qui atteignent le point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 en ayant subi deux événements de diffusion en \mathbf{x}_2 et \mathbf{x}_1 (voir [Fig. 3.5c](#)).
- $C_{j \geq 4}$: les luminances associées aux photons émis en \mathbf{x}_j dans une direction \mathbf{u}_{j-1} atteignant le point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 en ayant subi $j - 1$ événements de diffusion.

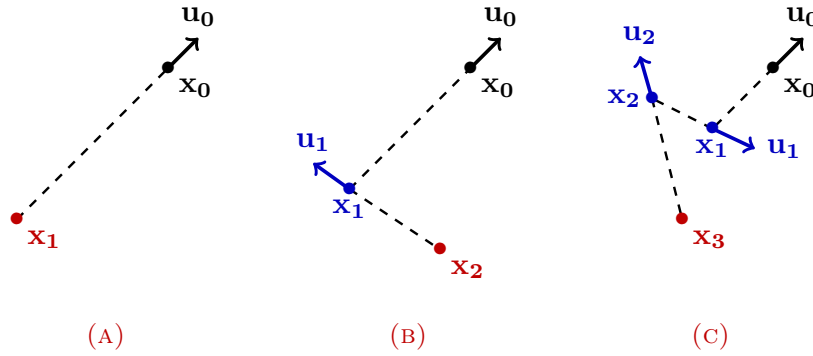


FIGURE 3.5 – Luminance en milieu diffusant. La luminance au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 peut être perçue comme la somme d’une infinité de composantes. La première d’entre-elles (A) est associée aux photons émis d’un point \mathbf{x}_1 appartenant à la demi droite définie par \mathbf{x}_0 et $-\mathbf{u}_0$ dans la direction \mathbf{u}_0 , sans avoir subi d’événement de diffusion. La seconde composante (B) concerne les photons émis en \mathbf{x}_2 dans le domaine spatial d’intérêt et atteignant le point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 suite à un unique événement de diffusion. La troisième composante est associée aux photons ayant subi deux événements de diffusion avant d’atteindre le point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 (C) *etc.*

Considérer la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ comme la somme d’une infinité de contributions, permet alors d’écrire la formulation intégrale suivante :

$$\begin{aligned}
 L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \left\{ \int_0^\infty dl_1 \exp \left(- \int_0^{l_1} k_\eta(\mathbf{x}_0 - l'_1 \mathbf{u}_0) dl'_1 \right) k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \right\} \\
 + & \left\{ \int_0^\infty dl_1 \exp \left(- \int_0^{l_1} k_\eta(\mathbf{x}_0 - l'_1 \mathbf{u}_0) dl'_1 \right) k_{d,\eta}(\mathbf{x}_1) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right. \\
 & \times \left. \int_0^\infty dl_2 \exp \left(- \int_0^{l_2} k_\eta(\mathbf{x}_1 - l'_2 \mathbf{u}_1) dl'_2 \right) k_{a,\eta}(\mathbf{x}_2) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_2) \right\} \\
 + & \left\{ \int_0^\infty dl_1 \exp \left(- \int_0^{l_1} k_\eta(\mathbf{x}_0 - l'_1 \mathbf{u}_0) dl'_1 \right) k_{d,\eta}(\mathbf{x}_1) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right. \\
 & \times \int_0^\infty dl_2 \exp \left(- \int_0^{l_2} k_\eta(\mathbf{x}_1 - l'_2 \mathbf{u}_1) dl'_2 \right) k_{d,\eta}(\mathbf{x}_2) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2) d\mathbf{u}_2 \\
 & \times \left. \int_0^\infty dl_3 \exp \left(- \int_0^{l_3} k_\eta(\mathbf{x}_2 - l'_3 \mathbf{u}_2) dl'_3 \right) k_{a,\eta}(\mathbf{x}_3) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_3) \right\} \\
 + & \{ \dots \}
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

où $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - l_{j+1} \mathbf{u}_j$ et où chaque terme entre accolades correspond à une contribution particulière (le premier est relatif à la contribution C_1 , le second à la contribution C_2 , *etc.*). Cette expression met en relief les avantages en termes d’intuitif et de formalisme qu’offre la réciprocity des chemins. Les images associées à ce cas d’étude sont celles de photons émis depuis \mathbf{x}_0 dans la direction $-\mathbf{u}_0$ subissant 0, 1, 2, *etc.* diffusions avant d’être absorbés de façon exponentielle le long de leur chemin optique.

représentent respectivement les probabilités qu'un photon qui collisionne en \mathbf{x}_j d'être absorbé ou émis : $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j)$ (selon qu'on regarde le problème de façon directe ou réciproque) et d'être diffusé : $1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j)$. Ces considérations nous permettent alors d'exprimer statistiquement l'Eq. 3.66 comme :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty p_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \end{array} \right\} \quad (3.68)$$

où le terme récursif $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ est donné par

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \quad (3.69)$$

L'Eq. 3.68 ne constitue qu'une expression de l'espérance de la luminance d'équilibre au point d'émission du photon. En effet, la récursivité due aux événements de diffusion ne joue un rôle que sur la longueur du chemin optique et sur les propriétés rencontrées le long de ce chemin (coefficient d'absorption, de diffusion, température, etc.). On peut alors écrire :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)] = \mathbb{E} [W(\mathbf{X}^*)] \quad (3.70)$$

avec \mathbf{X}^* la variable aléatoire associée aux positions d'émission. Celle-ci peut être exprimée de la façon suivante⁵ :

$$\mathbf{X}^* = \sum_{j=1}^{\infty} A_j \mathbf{X}_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \quad (3.71)$$

où A_q est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$ et 0 avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$. Ce formalisme récursif ainsi que les images physiques associées seront intensivement utilisés dans les prochains chapitres de ce document.

Il est alors possible de proposer un algorithme de Monte-Carlo constitué de N_{mc} réalisations indépendantes, chacune composée des étapes suivantes :

5. Le formalisme utilisé pour exprimer la variable aléatoire de position d'émission dans l'Eq. 3.71, a été choisi afin de mettre en avant l'idée de chemin de multi-diffusion. La somme infinie $\sum_{j=1}^{\infty}$ permet de rendre compte de l'ensemble des collisions probables. L'introduction de la variable aléatoire A_j , associée à un événement d'émission/absorption (valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$), permet de s'assurer, grâce au terme $\prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q)$ que seule une position (celle d'émission) soit retenue pour la définition de \mathbf{X}^* .

ALGORITHME

1. L'indice de collision j est initialisé : $j = 0$.
2. On échantillonne un libre parcours l_{j+1} selon la fonction densité de probabilité $p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1})$, ce qui permet de calculer la position de collision $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - l_{j+1}\mathbf{u}_j$.
3. On procède à un test de Bernoulli pour déterminer le type de collision : une émission ou une diffusion. Pour cela on tire uniformément un nombre aléatoire r_{j+1} .
 - 3a. Si $r_{j+1} < \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})$, la collision est une émission. On calcule alors la luminance d'équilibre au point \mathbf{x}_1 qui correspond à l'échantillon w_i de cette réalisation. La récursivité est alors stoppée.
 - 3b. Si $r_{j+1} > \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})$, la collision est une diffusion. Une nouvelle direction de propagation \mathbf{u}_{j+1} est alors échantillonnée à partir de la fonction de phase $\phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1})$; l'indice de la collision est incrémenté : $j \equiv j + 1$ et l'algorithme boucle à l'étape 2.

Dans la suite du manuscrit, du fait de la lourdeur engendrée par ce type de récursivité, nous présenterons les algorithmes sous forme de logigrammes. Une transposition directe de cet algorithme est donnée à la [Fig. 3.6](#).

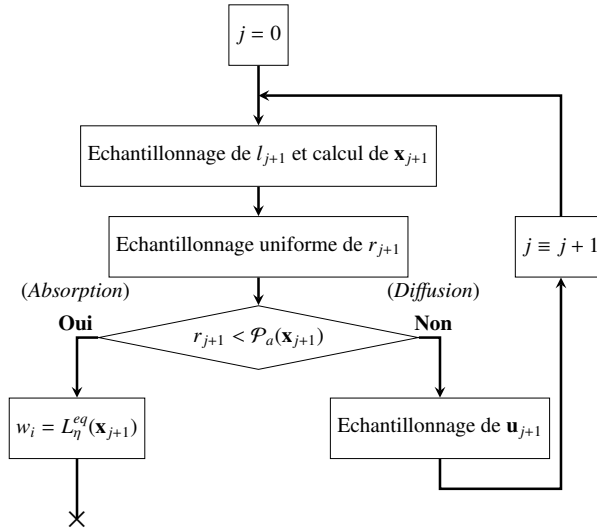


FIGURE 3.6 – Algorithme de Monte-Carlo estimant $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu infini absorbant, diffusant et émettant. Un libre parcours l_1 est d'abord échantillonné, conduisant à une position de collision \mathbf{x}_1 . Cette collision pouvant être soit une émission soit une diffusion, un test de Bernoulli est effectué : un nombre aléatoire r_1 est échantillonné. Si $r_1 < \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)$, il y a émission en \mathbf{x}_1 , le poids de Monte-Carlo est alors $w_1 = L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1)$. Si $r_1 > \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)$, la collision est une absorption, une direction \mathbf{u}_1 et un nouveau libre parcours l_2 sont alors échantillonnés, menant ainsi à un nouveau point de collision \mathbf{x}_2 où un test de Bernoulli sera effectué pour déterminer le type de collision. L'algorithme continuera ainsi, jusqu'à ce qu'une absorption soit identifiée.

Les images physiques correspondantes sont encore celles de photons suivis depuis la position \mathbf{x}_0 dans la direction opposée à \mathbf{u}_0 , jusqu'à ce qu'ils soient absorbés en \mathbf{x}^* . Mais le chemin optique est désormais un chemin de multi-diffusion. Au premier point de collision \mathbf{x}_1 , il y a une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)$ que les photons soient absorbés. Dans ce cas $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_1$. Autrement, ils diffusent dans une direction \mathbf{u}'_1 avec une probabilité $(1 - \mathcal{P}_a(x_1))$. Les photons sont alors suivis jusqu'à la prochaine collision en \mathbf{x}_2 qui peut, à son tour, être soit une nouvelle diffusion, soit une absorption et ainsi de suite jusqu'à ce qu'un point d'absorption soit identifié. La luminance d'équilibre en ce point est alors considérée.

Une autre manière d'aborder ce problème consiste à le définir dans l'espace des chemins [Dauchet, 2012]. Cet espace est défini comme l'ensemble des chemins de multi-diffusion possibles passant en \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 . Les images statistiques correspondantes consistent alors à considérer un chemin optique appartenant à cet espace et à suivre les photons le long de ce chemin, de la même façon qu'ils le seraient dans le cas d'un milieu purement absorbant/émettant.

3.4.2 Traitement déterministe des tests de Bernoulli ou méthode dite d'*Energy partitioning*

Comme présenté précédemment, toutes les contributions à la variable aléatoire $W(\mathbf{X}^*)$ sont uniquement liées aux événements d'émission : $W(\mathbf{X}^*) = L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)$. Imaginons désormais que le milieu considéré soit fortement diffusant et peu absorbant/émissif : l'essentiel du temps de calcul sera alors consacré à traiter les événements de diffusion qui n'ont aucun autre rôle que de permettre un échantillonnage de l'espace des chemins. À de très rares moments, des émissions seront prises en compte, mettant ainsi fin à la réalisation.

Une manière de répondre à ce problème est d'employer une méthode qui consiste à ôter le caractère probabiliste des albédos d'émission $\frac{k_{a,\eta}}{k_\eta}$ et de diffusion $\frac{k_{d,\eta}}{k_\eta}$ en les traitant de façon déterministe. Ainsi, à chaque collision, une contribution d'absorption/émission sera prise en compte. Cette approche, initialement développée pour calculer l'émittance apparente de cavités isothermes [Shamsundar *et al.*, 1973], est connue sous différentes dénominations : "Energy partitioning" [Modest, 2003b], "Absorption suppression" [Walters et Buckius, 1992] ou encore "Pathlength method" [Farmer et Howell, 1998]. L'utilisation de cette technique consiste donc à reformuler l'Eq. 3.68 en :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty p_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \times \left\{ \begin{aligned} & \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \\ & + \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \end{aligned} \right\} \quad (3.72)$$

où les grandeurs $\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)}$ et $\frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)}$ sont utilisés de manière déterministe. La luminance d'intérêt $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ est alors définie comme l'espérance d'une variable aléatoire un

peu plus complexe :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} \left[\sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) \prod_{q=1}^{j-1} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{k_\eta(\mathbf{x}_q)} \right) \right] \quad (3.73)$$

Les images physiques associées à ce traitement déterministe des albédos sont alors sensiblement modifiées. Plutôt que de suivre des photons depuis \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 jusqu'à ce qu'ils soient absorbés en un point \mathbf{x}_j , ils sont ici absorbés de façon progressive le long de leur chemin optique.

L'Eq. 3.73 pose cependant dans notre cas d'étude (milieu infini) un problème majeur lorsqu'il s'agit de la traduire algorithmiquement : la récursion est infinie, le calcul ne s'arrête donc jamais (voir Fig. 3.7). En partant du constat que plus l'indice

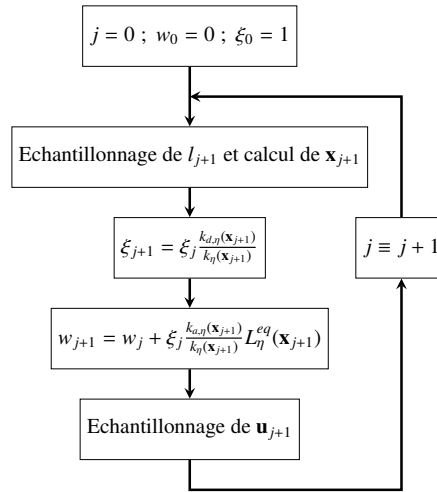


FIGURE 3.7 – Algorithme de Monte-Carlo avec traitement déterministe pur des albédos. Un libre parcours d'extinction l_1 est échantillonné à partir de \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 , menant ainsi à un point de collision \mathbf{x}_1 . En ce point de collision, une contribution d'émission $\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1)$ est prise en compte. Puis une nouvelle direction \mathbf{u}_1 et un nouveau libre parcours l_2 sont échantillonnés, menant à un nouveau point de collision \mathbf{x}_2 pour lequel une contribution d'émission $\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_2)}{k_\eta(\mathbf{x}_2)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_2) \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)}$ est à nouveau ajoutée au poids de Monte-Carlo w_i . L'algorithme poursuit ainsi cette boucle indéfiniment. Il est alors nécessaire de définir un critère d'arrêt pour y mettre fin (voir Fig. 3.8).

de collision j est grand, plus le terme $\xi_j = \prod_{q=1}^{j-1} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{k_\eta(\mathbf{x}_q)}$ est faible, deux alternatives sont envisageables pour répondre à cette infinité de boucles :

- lorsque ξ_j devient suffisamment proche de zéro, on stoppe la réalisation, tronquant ainsi la somme infinie. Un léger biais est alors créé, faisant ainsi perdre à l'algorithme de Monte-Carlo son caractère de méthode de référence.
- lorsque ξ_j passe en dessous d'un seuil ζ défini arbitrairement entre 0 et 1, on rétablit le caractère probabiliste des albédos : on bascule alors à l'algorithme présenté à la Sec. 3.4.1. L'algorithme résultant d'un tel choix, privilégié dans la suite du manuscrit, est décrit par la Fig. 3.8.

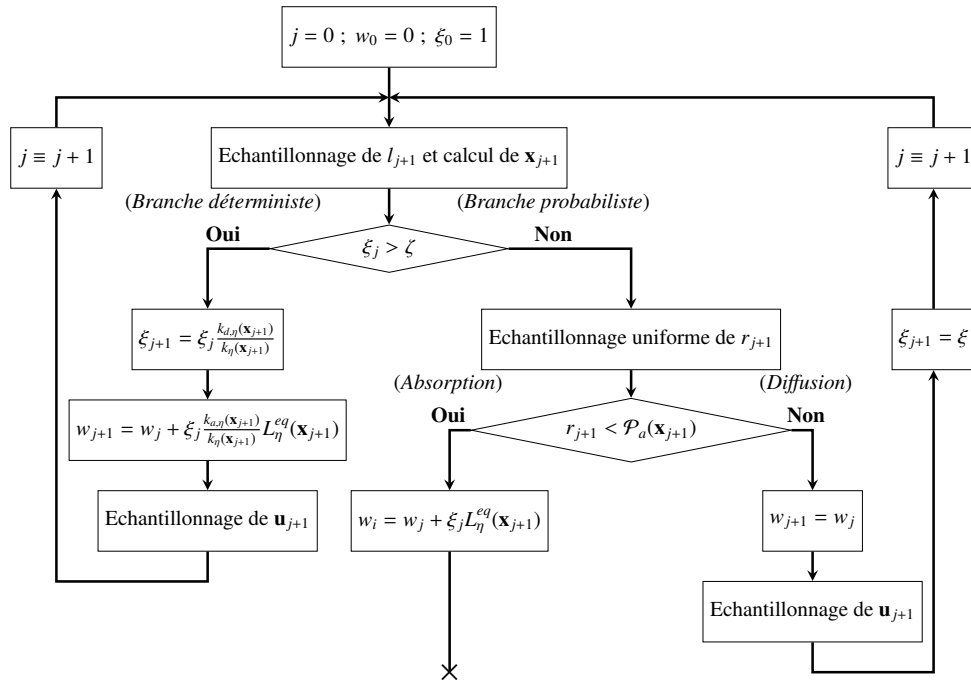


FIGURE 3.8 – Algorithme de Monte-Carlo avec traitement déterministe puis stochastique des albédos. Tant que le critère d'extinction $\xi_j = \prod_{q=1}^{j-1} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{k_{\eta}(\mathbf{x}_q)}$ est supérieur au seuil arbitraire ζ , l'algorithme est identique à celui présenté à la Fig. 3.7. Une fois ce seuil atteint, l'algorithme bascule sur une branche dans laquelle les albédos de diffusion et d'absorption sont traités de façon statistique (similaire à l'algorithme présenté à la Fig. 3.6) pour mettre fin à la réalisation.

3.4.3 Calcul de sensibilités paramétriques

Les méthodes de Monte-Carlo offrent également l'avantage de pouvoir estimer des sensibilités paramétriques⁶ en parallèle du calcul de l'observable radiative, sans augmenter de manière sensible le temps de calcul. En effet, du fait de la linéarité de l'expression intégrale considérée, la structure algorithmique correspondante ne sera pas altérée lorsqu'il s'agira d'estimer une sensibilité paramétrique de cette même grandeur. Pour illustrer cette possibilité offerte par les méthodes de Monte-Carlo, repartons de l'Eq. 3.68 et exprimons la sensibilité paramétrique $\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ de la luminance $L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, selon un paramètre ϖ ayant une influence sur la seule fonction de phase (le paramètre d'asymétrie par exemple). Exprimer cette sensibilité paramétrique revient alors à dériver $L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ par rapport à ϖ :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \int_0^{\infty} dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) \times 0 \\ & + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \left\{ \begin{aligned} & \partial_{\varpi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \\ & + \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (3.74)$$

Pour garder la même structure statistique et algorithmique que celle de l'estimation de la luminance $L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, l'Eq. 3.74 peut être reformulée en :

$$\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{\infty} dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) \times 0 \\ & + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \\ & \times \left[\begin{aligned} & \partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))] L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \\ & + \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right\} \quad (3.75)$$

Cette équation comporte désormais deux termes récursifs : $L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ et $\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$. Le premier est le même que pour l'estimation de la luminance $L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (voir Eq. 3.69) et le second est donné par :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = & \int_0^{\infty} dl_{j+1} p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) \times 0 \\ & + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_{j+1} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) \\ & \times \left[\begin{aligned} & \partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}))] L_{\eta}(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) \\ & + \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (3.76)$$

6. Dans [De La Torre *et al.*, 2014], les auteurs distinguent plusieurs familles de sensibilités paramétriques : 1/ celles où seul le poids de Monte-Carlo dépend du paramètre d'intérêt 2/ celles où le paramètre n'intervient que dans les probabilités de la formulation intégrale 3/ celles où le domaine d'intégration est dépendant du paramètre par rapport auquel est calculée la sensibilité 4/ une combinaison des trois cas précédents. Dans le cadre de ces travaux de thèse, seul le second cas - illustré dans la présente section - sera abordé.

Toutefois, ces deux termes, ayant une même structure d'un point de vue statistique, peuvent être pris en compte simultanément. Il est ainsi possible d'exprimer la sensibilité de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ au paramètre ϖ comme une unique espérance :

$$\begin{aligned} \partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)] \sum_{j=1}^{\infty} \left(A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \right) \left(\sum_{m=1}^{j-1} \partial_\varpi [\ln(\phi(\mathbf{X}_m, \mathbf{U}_{m-1} | \mathbf{U}_m))] \right) \\ &= \mathbb{E} [W_\varpi(\mathbf{X}^*)] \end{aligned} \quad (3.77)$$

où A_q est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$ et 0 avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$ et où \mathbf{X}^* est définie de la même façon que pour l'estimation de $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (voir Eq. 3.71). Le détail de ces calculs est donné en Annexe A.

Il est alors possible d'estimer cette sensibilité paramétrique de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ conjointement à l'estimation de cette luminance. La description d'une réalisation de l'algorithme de Monte-Carlo correspondant est donnée à la Fig. 3.9.

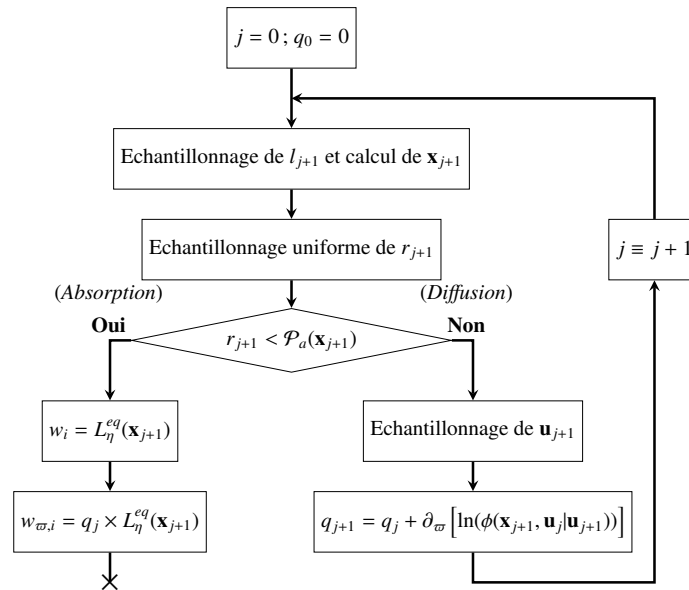


FIGURE 3.9 – Algorithme de Monte-Carlo estimant de façon simultanée une luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu participant infini et sa sensibilité à un paramètre ϖ de la fonction de phase. La structure algorithmique est identique à celle de la Fig. 3.3 ; seul un facteur incrémental q_j est rajouté pour calculer l'expression du poids de Monte-Carlo w_i .

L'estimation de $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ pour N_{mc} réalisations de Monte-Carlo est alors donnée par $\tilde{L}_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i / N_{mc}$ et l'estimation de sa sensibilité au paramètre ϖ par $\tilde{\partial}_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_{\varpi,i} / N_{mc}$.

3.4.4 Luminance dans un milieu purement absorbant, diffusant et entouré de parois réfléchissantes

Reprenons le cas présenté à la [Sec. 3.4.1](#) : un milieu absorbant, émettant et diffusant et considérons le désormais comme fini et entouré par des parois partiellement réfléchissantes (voir [Fig. 3.10](#)). À partir de l'[Eq. 3.65](#), il est possible de faire

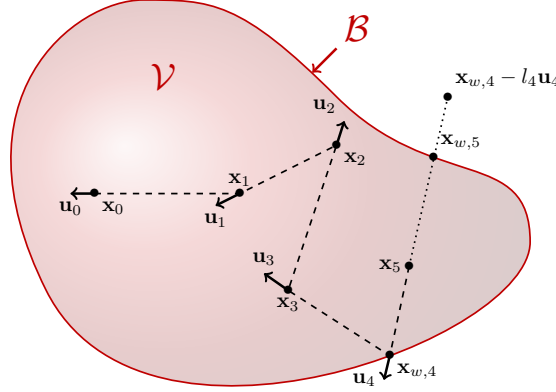


FIGURE 3.10 – Milieu absorbant, émettant et diffusant, clos par des parois partiellement réfléchissantes. Les images physiques associées à l'estimation de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ sont celles de photons suivis depuis \mathbf{x}_0 dans la direction $-\mathbf{u}_0$ jusqu'à leur point d'émission à la paroi \mathcal{B} (voir $\mathbf{x}_{w,5}$) ou dans le milieu \mathcal{V} (voir \mathbf{x}_5). Le long de leur chemin optique, ces photons sont susceptibles de subir des événements de diffusion multiple (voir $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$) ou de réflexion (voir \mathbf{x}_4).

apparaître une prise en compte des parois comme proposée à la [Sec. 3.3.3](#). La seule différence concerne les conditions aux frontières : dans la [Sec. 3.3.3](#) les parois étaient considérées comme noires, désormais elles sont partiellement réfléchissantes. Dans des considérations réciproques, seule une proportion $\varepsilon(\mathbf{x}_w)$ des photons est absorbée par la paroi, autrement ces photons sont réfléchis et continuent leur chemin dans une nouvelle direction selon une distribution directionnelle de réflexion $\psi(\mathbf{x}_{w,1}, \mathbf{u}_0|\mathbf{u}_1)$. On se ramène donc aux parois, à une expression très proche de celle rencontrée lors de multi-diffusions. La luminance au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 est alors donnée par la formulation intégrale récursive suivante :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty dl_1 k_\eta(\mathbf{x}_1) \exp\left(-\int_0^{l_1} k_\eta(\mathbf{x}_0 - l'_1 \mathbf{u}_0) dl'_1\right) \times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{H}(\mathbf{x}_1 \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\varepsilon(\mathbf{x}_{w,1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,1}) \\ &+ (1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,1}, \mathbf{u}_0|\mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_{w,1}, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \end{aligned} \right\} \\ &+ \mathcal{H}(\mathbf{x}_1 \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \\ &+ \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_1)}{k_\eta(\mathbf{x}_1)} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0|\mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (3.78)$$

où le point $\mathbf{x}_{w,j+1}$ correspond à la première intersection entre la frontière et la demi-droite définie par le point \mathbf{x}_j et la direction $-\mathbf{u}_j$. Le terme récursif $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$, présent

à deux reprises dans l'Eq. 3.78, est donné par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} k_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp \left(- \int_0^{l_{j+1}} k_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1} \mathbf{u}_j) dl'_1 \right) \\ \times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ &+ (1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \\ &+ \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{k_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ &+ \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{k_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (3.79)$$

Il est alors possible de remplacer les termes d'extinction, d'émissivité, de réflectivité et albédos de diffusion et d'absorption par leur notation sous forme de probabilité. Il vient alors la formulation statistique :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \\ \times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ &+ (1 - \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \\ &+ \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (3.80)$$

pour laquelle l'observable où $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ est un cas particulier (validant $j = 0$) et où $\mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,1}) = \varepsilon(\mathbf{x}_{w,1})$ correspond à la probabilité que le photon soit émis par la paroi.

À nouveau, cette expression de la luminance correspond à l'espérance de la luminance d'équilibre au point d'émission \mathbf{X}^* :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)] = \mathbb{E} [W(\mathbf{X}^*)] \quad (3.81)$$

Toutefois, la variable aléatoire \mathbf{X}^* intègre désormais l'idée de réflexion aux parois. Elle peut être exprimée comme :

$$\mathbf{X}^* = \sum_{j=1}^\infty \left[\mathcal{H}(X_j \in \mathcal{V}) A_j X_j + \mathcal{H}(X_j \notin \mathcal{V}) E_j X_{w,j} \right] \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q - E_q) \quad (3.82)$$

où A_j est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j)$, 0 sinon, et E_j une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j})$, 0 sinon. Une réalisation indépendante de la traduction algorithmique de l'Eq. 3.82 est donnée à la Fig. 3.11.

Ce cas d'étude constitue le cas le plus général rencontré dans ce manuscrit (absorption, réflexion, diffusion, émission). Les trois configurations décrites précédemment dans ce chapitre ne sont que des cas particuliers du cas d'étude présent :

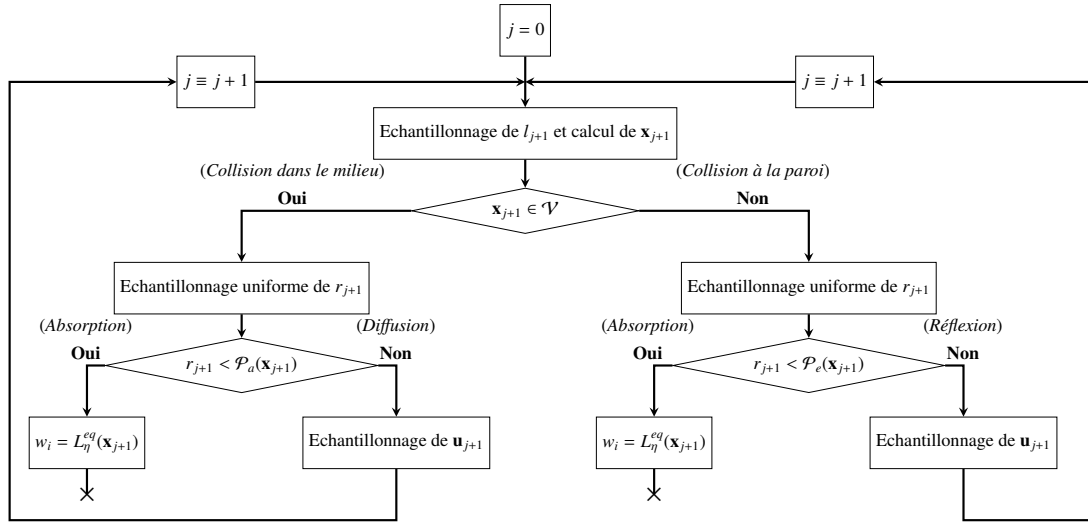


FIGURE 3.11 – Algorithme estimant $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu absorbant, émettant et diffusant, clos par des parois partiellement réfléchissantes. Une position de collision \mathbf{x}_1 est tout d’abord déterminée par l’échantillonnage d’un libre parcours l_1 selon la loi de Beer-Lambert. Le point \mathbf{x}_1 peut être dans le milieu participant ou non. S’il appartient au milieu participant, un test de Bernoulli est effectué pour déterminer le type de collision. Si c’est une absorption, le poids de Monte-Carlo est calculé et la réalisation s’arrête. Dans le cas d’une diffusion, une nouvelle direction \mathbf{u}_1 est échantillonnée selon la fonction de phase $\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1)$ et l’algorithme boucle à l’étape d’échantillonnage des libres parcours. Dans le cas où le point \mathbf{x}_1 n’appartient pas au milieu participant, un test de Bernoulli est effectué pour déterminer si la collision à la paroi en $\mathbf{x}_{w,1}$ est une absorption ou une réflexion. S’il s’agit d’une absorption, la réalisation s’arrête et le poids de Monte-Carlo est calculé. S’il s’agit d’une réflexion, une direction \mathbf{u}_1 est échantillonnée selon le modèle probabiliste de réflexion $\psi(\mathbf{x}_{w,1}, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1)$ et l’algorithme boucle à l’étape d’échantillonnage des libres parcours. Ces boucles se poursuivent jusqu’à ce qu’une absorption par le milieu ou à la frontière se produise.

- La suppression des termes de parois mène au cas d'étude de la [Sec. 3.4.1](#).
- Lorsque le coefficient de diffusion est nul et l'émissivité à la paroi est de 1 cela correspond au cas d'étude de la [Sec. 3.3.3](#).
- La suppression des termes de parois et un coefficient de diffusion nul mènent au cas d'étude de la [Sec. 3.3.1](#).

3.5 Étude d'une grandeur intégrée de la luminance

Jusqu'alors, tous les cas d'étude consistaient à évaluer la luminance en un point en échantillonnant des positions d'émission et en moyennant les luminances d'équilibre en ces points. Les représentations des différents phénomènes faisaient apparaître de façon directe des grandeurs probabilisées (atténuation exponentielle, albédos d'absorption / de diffusion ou encore émissivité / réflectivité). Cette dernière section a pour but de présenter l'approche statistique relative à une intégration de cette luminance. En guise d'illustration, reprenons la configuration de la [Sec. 3.4.4](#) et étudions le bilan radiatif d'un sous-volume homogène et isotherme $\delta\mathcal{V}$ du milieu \mathcal{V} . Celui-ci s'exprime comme :

$$\Phi(\delta\mathcal{V}) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} d\eta \int_{\delta\mathcal{V}} d\mathbf{x}_0 \int_{4\pi} d\mathbf{u}_0 k_a(\mathbf{x}_0) (L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) - L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) \quad (3.83)$$

Formulées ainsi, on note que les intégrations sur la plage spectrale $[\eta_{\min}, \eta_{\max}]$, le volume d'intérêt V et l'ensemble des directions 4π ne constituent que de simples sommes déterministes, ne nous permettant pas, en l'état, d'approcher ce problème de façon purement statistique. Pour répondre à cette limite, il est possible de considérer les variables η_0 , \mathbf{x}_0 et \mathbf{u}_0 comme aléatoires en leur associant à chacune une densité de probabilité : respectivement $p_H(\eta)$, $p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0)$ et $p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0)$. Ces densités de probabilité peuvent désormais être introduites dans l'expression intégrale. Pour rétablir le caractère intégral de $\Phi(\delta\mathcal{V})$, la grandeur $k_a(\mathbf{x}_0) (L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) - L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0))$ est alors divisée par ces trois probabilités :

$$\begin{aligned} \Phi(\delta\mathcal{V}) &= \int_{\Delta\eta} p_H(\eta) d\eta \int_{\delta\mathcal{V}} p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \int_{4\pi} p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_0) (L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) - L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0))}{p_H(\eta) p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0)} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_0) (L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) - L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0))}{p_H(\eta) p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0)} \right] \end{aligned} \quad (3.84)$$

Le problème, à l'origine exprimé de façon déterministe, a ainsi pu être reformulé dans des considérations purement statistiques. Ne reste alors plus qu'à exprimer la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Si l'on reprend la configuration de la [Sec. 3.4.4](#), il est possible d'écrire à partir des équations [3.81](#) et [3.84](#)

$$\Phi(\delta\mathcal{V}) = \mathbb{E} \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_0) (L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) - \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)])}{p_H(\eta) p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0) p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0)} \right] = \mathbb{E} [W(X^*)] \quad (3.85)$$

où la variable aléatoire \mathbf{X}^* est définie par l'Eq. 3.82. Du fait de la linéarité de l'expression de $W(\mathbf{X}^*)$ et du caractère projectif de l'espérance (cf. encadré de la Sec. 3.1.2), l'Eq. 3.85 peut être reformulée comme :

$$\Phi(\delta\mathcal{V}) = \mathbb{E} \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_0) (L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) - L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*))}{p_H(\eta)p_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}_0)p_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{u}_0)} \right] \quad (3.86)$$

L'algorithme de Monte-Carlo correspondant à cette expression est donné à la Fig. 3.12.

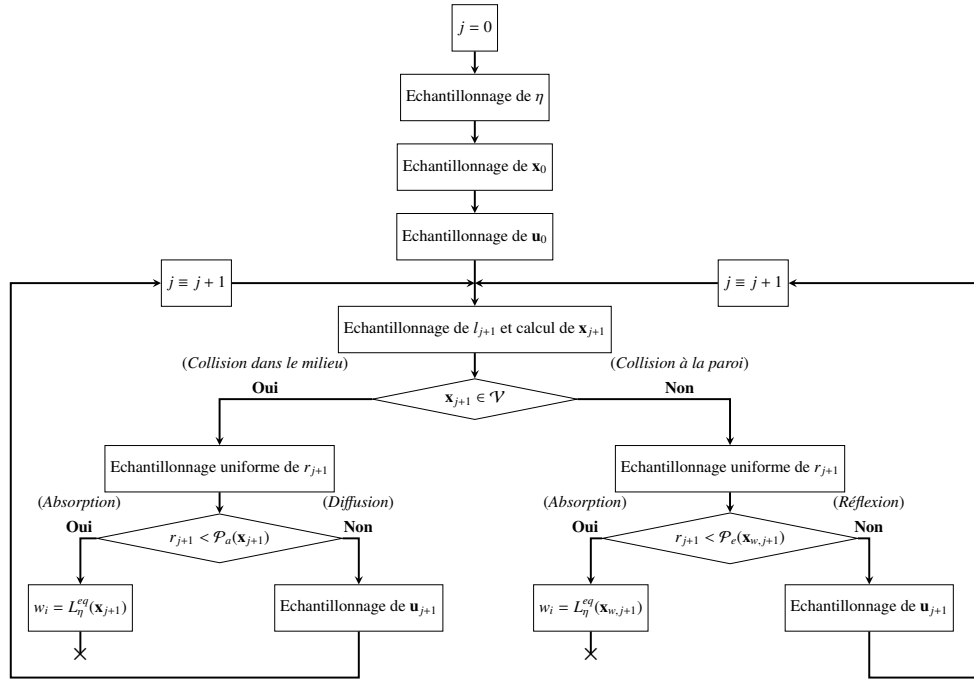


FIGURE 3.12 – Algorithme estimant le bilan radiatif d'un sous-volume homogène et isotherme $\delta\mathcal{V}$ du milieu \mathcal{V} . Cet algorithme est très proche de celui présenté à la Fig. 3.81 à deux différences près : 1/ une étape d'échantillonnage des nombres d'onde, des positions et des directions initiales est effectuée en début de réalisation ; 2/ l'expression des poids est modifiée en accord avec la nouvelle observable d'intérêt : $\Phi(\delta\mathcal{V})$.

Les images physiques réciproques associées à cet algorithme sont celles de photons de nombres d'onde $\eta \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]$, suivis depuis une position \mathbf{x}_0 appartenant à $\delta\mathcal{V}$, dans une direction \mathbf{u}_0 appartenant à la sphère des directions (4π), susceptibles de subir des diffusions et réflexions multiples avant d'être absorbés en un point du milieu ou par la paroi.

Résumé du chapitre

Ce chapitre a eu pour but de présenter l'approche statistique et intégrale associée à l'étude du rayonnement dans les milieux participants ainsi que les méthodes de Monte Carlo qui en découlent directement. Après de brefs rappels statistiques et

méthodologiques, l'étude d'un problème radiatif, progressivement complexifié, a permis d'aborder les différentes approches, techniques et formalismes qui seront employés dans la suite de ce manuscrit. La prise en compte des frontières, des phénomènes de diffusion (et donc de la récursivité), les approches d'échantillonnage préférentiel, de variance nulle, ainsi que les techniques d'*energy-partitioning* ont ainsi pu être présentées.

CHAPITRE 4

Prise en compte de l'hétérogénéité des propriétés radiatives du milieu

Introduction	92
4.1 Problèmes liés à l'hétérogénéité des propriétés optiques	93
4.1.1 Incapacité d'échantillonner analytiquement des libres parcours	93
4.1.2 Alternatives couramment proposées	94
4.1.3 Non-linéarité dans l'expression statistique de l'ETR	96
4.2 Les algorithmes à collisions nulles	97
4.2.1 Historique des algorithmes à collisions nulles	97
4.2.2 Principe des algorithmes à collisions nulles	99
4.2.3 Approche statistique des algorithmes à collisions nulles . .	100
4.2.4 Vers des coefficients de collision nulle négatifs	103
4.3 Mise en application et étude paramétrique	105
4.3.1 Description du cas d'étude	105
4.3.2 Traitement statistique du type de collision	110
4.3.3 Traitement déterministe des événements d'émission	120
4.3.4 Enseignements sur les choix du \hat{k}_η et du type d'algorithme	129
4.4 Validation d'un solveur radiatif par les algorithmes à collisions nulles	129
4.4.1 Description du cas d'étude et de l'exercice de validation .	130
4.4.2 Résultats obtenus	133
Résumé du chapitre	134

Introduction

Les éléments essentiels de la physique du rayonnement ainsi que des Méthodes de Monte-Carlo appliquées à ce champ d'application ayant été présentés ; ce chapitre a pour but d'aborder les premiers travaux de cette thèse : la gestion des hétérogénéités des propriétés optiques du milieu participant. Ces travaux constituent la suite logique d'une dynamique collective initiée depuis plusieurs années au sein de l'équipe STARWest [Terrée, 2011, Piaud, 2010, Eymet, 2011a].

Les méthodes de Monte-Carlo en milieu semi-transparent sont aujourd'hui bien maîtrisées [Farmer et Howell, 1998, Siegel *et al.*, 2011, Modest, 2013]. C'est en particulier le cas lorsque les propriétés optiques du milieu (coefficients d'absorption, de diffusion, *etc.*) sont homogènes. Mais au-delà de cas académiques simples, dès qu'il s'agit d'étudier ou de simuler du transfert radiatif en configurations réelles dans des milieux participants, en particulier dans les gaz, la prise en compte et la gestion des hétérogénéités apparaissent comme primordiales. Ces tâches deviennent cependant rapidement délicates et exigeantes lorsqu'il s'agit d'employer les méthodes de Monte-Carlo comme outil de simulation, tout en souhaitant garder le caractère exact qu'elles offrent.

Si l'on se concentre sur les domaines d'application pour lesquels le transfert radiatif en milieu gazeux occupe une place importante, les hétérogénéités sont omniprésentes. En effet, que ce soit dans les systèmes de combustion, dans les atmosphères terrestre ou exoplanétaires, on rencontre généralement de fortes hétérogénéités de température, de concentrations d'espèces ou de pression, menant à d'importantes variations des propriétés optiques du milieu observé. Une prise en compte rigoureuse de ces disparités spatiales est alors nécessaire pour mener à bien l'évaluation des observables d'intérêt. Cependant les difficultés qu'elles impliquent nécessitent généralement de recourir à des hypothèses simplificatrices ou à des méthodes entraînant des erreurs non maîtrisées.

Dans une volonté de préserver le caractère exact dont bénéficient les méthodes de Monte-Carlo et l'analyse statistique associée, un des principaux objets de cette thèse a été de proposer une méthode prenant en compte la complexité de ces hétérogénéités, sans faire appel à une quelconque approximation. La solution retenue : les *algorithmes à collisions nulles* fera l'objet de ce chapitre. Cette méthode, jusqu'alors absente de la littérature du rayonnement thermique, mais très employée dans d'autres disciplines de la physique du transport (neutronique et physique des plasmas) y sera décrite et adaptée à des problématiques radiatives. Tout au long de ce chapitre, la dimension spectrale sera ignorée. Les problèmes seront donc ramenés à des cas monochromatiques (l'intégration spectrale fera l'objet du chapitre [Chap. 5](#)).

Dans un premier temps, les difficultés relatives à la gestion des hétérogénéités par les méthodes de Monte-Carlo, ainsi que les techniques couramment utilisées pour y répondre seront présentées.

Un bref état de l'art de la littérature relative aux algorithmes à collisions nulles sera

ensuite dressé. Puis, ces méthodes seront introduites et élargies à l'étude du transfert radiatif. Une extension du domaine de validité de ces méthodes sera également proposée.

L'approche retenue, reposant sur l'introduction d'un coefficient virtuel de collision nulle $k_{n,\eta}$, sera ensuite éprouvée face à un cas d'étude plus complexe : l'estimation d'un bilan radiatif dans un milieu tridimensionnel, absorbant, émettant et diffusant, entouré par des parois réfléchissantes. Ces simulations donneront lieu à une étude paramétrique permettant d'évaluer les influences du coefficient de collision nulle, des choix méthodologiques et de différentes propriétés optiques sur le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo retenu.

Dans la quatrième section, nous montrerons comment le caractère de solution de référence des algorithmes à collisions nulles peut être mis à profit dans la validation d'un code de calcul radiatif en géométrie complexe (la configuration retenue sera celle d'une chambre de combustion).

La rédaction de ce chapitre s'appuie sur les deux publications [Galtier *et al.*, 2013], [Eymet, 2011b] (données en Annexe D et Annexe E) qui ont fait suite aux travaux présentés dans le présent manuscrit.

4.1 Problèmes liés à l'hétérogénéité des propriétés optiques du milieu participant

4.1.1 Incapacité d'échantillonner analytiquement des libres parcours

Pour illustrer les difficultés rencontrées lorsque les propriétés optiques du milieu ne sont pas uniformes, reprenons la configuration de la Sec. 3.3.1 : le calcul de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu infini purement absorbant/émettant. Ce cas d'étude est suffisant pour aborder le problème relatif aux hétérogénéités. Le passage à un cas diffusif ou à une géométrie fermée n'entraînera aucune difficulté supplémentaire - si ce n'est de formalisme. Dans ces considérations, l'expression statistique de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ est donnée par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty p_{\mathcal{L}}(l) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) dl \quad (4.1)$$

où $p_{\mathcal{L}}(l) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) dl'\right)$ est la densité de probabilité des libres parcours d'absorption et où $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0$ correspond à la position d'émission.

La traduction de cette formulation en un algorithme de Monte-Carlo consiste à échantillonner un grand nombre de libres parcours l conduisant à une position d'émission $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0$ et à moyenner les luminances d'équilibre en ces points d'émission. Cette moyenne d'échantillon constituera alors un estimateur non biaisé de l'observable d'intérêt $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Toutefois, dans le Chap. 3, nous avons délibérément omis de présenter et de détailler l'échantillonnage de ces libres parcours, qui peut

s'avérer impossible à réaliser de manière analytique. En pratique, pour réaliser l'échantillonnage d'un libre parcours l_i (cf. [Sec. 3.2.3.1](#)) selon une fonction densité de probabilité $p_{\mathcal{L}}(l)$ définie et normée sur $[0, \infty[$, on génère uniformément un nombre aléatoire r_i entre 0 et 1 et on résout l'équation

$$\begin{aligned} r_i &= \int_0^{l_i} p_{\mathcal{L}}(l') dl' \\ &= \int_0^{l_i} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l' \mathbf{u}_0) \exp \left(- \int_0^{l'} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'' \mathbf{u}_0) dl'' \right) dl' \end{aligned} \quad (4.2)$$

pour remonter à la valeur échantillonnée l_i du libre parcours. En d'autres termes, il faut donc être capable d'inverser analytiquement la fonction de répartition de la variable aléatoire \mathcal{L} pour échantillonner les libres parcours.

Lorsque la fonction de répartition $\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}) \exp \left(- \int_0^{l'} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'' \mathbf{u}_0) dl'' \right) dl'$ peut être exprimée de façon analytique et en particulier lorsque le champ de $k_{a,\eta}$ est uniforme, l'échantillonnage de libres parcours ne pose aucun problème. Pour un champ de coefficient d'absorption uniforme, la résolution de l'[Eq. 4.2](#) :

$$\begin{aligned} r_i &= \int_0^{l_i} k_{a,\eta} \exp(-k_{a,\eta} l') dl' \\ &= 1 - \exp(-k_{a,\eta} l_i) \end{aligned} \quad (4.3)$$

conduit à l'échantillon l_i suivant :

$$l_i = - \frac{\ln(1 - r_i)}{k_{a,\eta}} \quad (4.4)$$

Toutefois pour des configurations réelles, il est très rare que les propriétés optiques du milieu d'intérêt soient telles qu'il soit possible d'inverser la cumulée de $p_{\mathcal{L}}(l)$ (l'épaisseur optique n'étant pas intégrable de façon analytique). L'échantillonnage des libres parcours, pourtant nécessaire pour les simulations par Monte-Carlo, devient dans ce cas une tâche délicate.

4.1.2 Alternatives couramment proposées

Pour répondre à cette limite, deux principales approches sont couramment employées dans la communauté du rayonnement thermique : la discrétisation des propriétés optiques du milieu et l'inversion numérique des épaisseurs optiques.

Discrétisation du milieu La plus commune d'entre-elles consiste à discrétiser spatialement le volume d'intérêt et à considérer les propriétés du milieu comme uniformes à l'intérieur de chaque maille (voir [Fig. 4.1](#)). De ce fait, il devient possible d'échantillonner de façon analytique les libres parcours d'extinction, puisque les propriétés optiques sont constantes par morceaux le long du chemin optique.

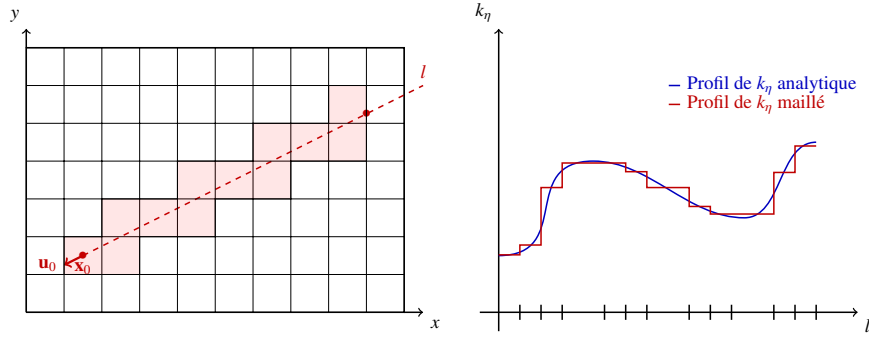


FIGURE 4.1 – Pour permettre un échantillonnage aisé des libres parcours, il est courant de discrétiser spatialement le milieu et d'approximer les champs de propriétés optiques comme uniformes à l'intérieur de chaque maille.

Une telle méthode possède cependant quelques limites. En effet, en discrétisant les propriétés optiques du milieu, le modèle physique est modifié. Les résultats de simulation dépendent alors du choix de maillage et les erreurs numériques causées par ce choix ne sont pas maîtrisées (un exemple volontairement pathologique est présenté à la Fig. 4.2). Même si les compétences développées par les spécialistes

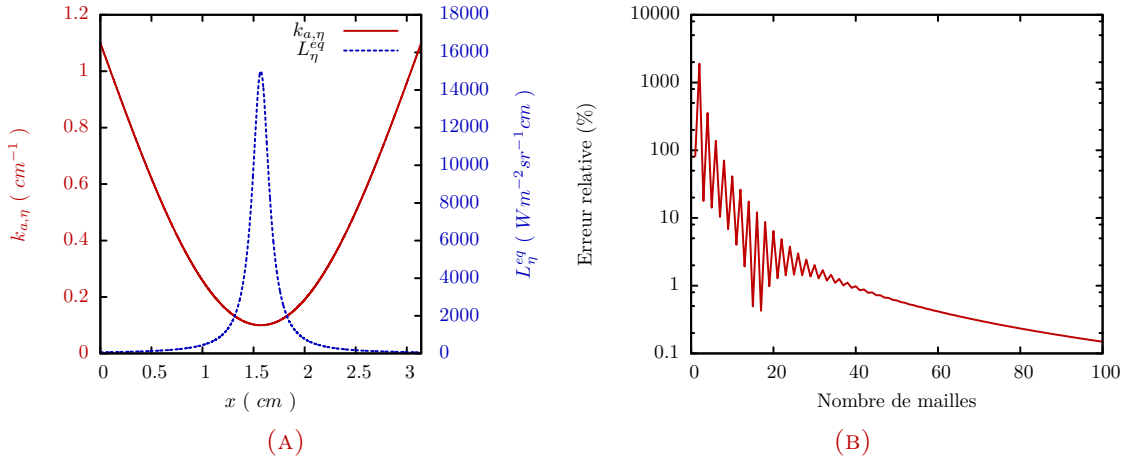


FIGURE 4.2 – Erreurs causées par la discrétisation des propriétés du milieu en fonction du nombre de mailles dans le cadre du calcul de la luminance $L_{\eta}(x = \pi, u^+)$ émise par un milieu participant monodimensionnel, non diffusant, défini sur $[0, \pi]$. Les profils analytiques de coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(x)$ et de luminance d'équilibre $L_{\eta}^{eq}(x)$ sont donnés par la Fig. (A). Ces profils sont alors approximatés par une discrétisation en N mailles de même dimension, dans lesquelles les propriétés sont moyennées et supposées uniformes. La Fig. (B) illustre alors l'erreur relative (en %) commise lors du calcul de $L_{\eta}(\pi)$ en fonction du nombre de mailles.

de ces approches maillées rendent généralement les erreurs causées par ce type de discrétisation faibles voire négligeables, ces dernières ne sont, en pratique, pas quantifiables, et font ainsi perdre aux méthodes de Monte-Carlo leur caractère de solution de référence.

La seconde contrainte associée à ce type de résolution est d'ordre purement pratique : il est nécessaire à chaque nouveau cas d'étude, à chaque modification de géométrie ou de champs de propriétés de repenser la discrétisation du milieu et de

produire un nouveau maillage. Cette étape nécessaire est généralement complexe et lourde à réaliser, en particulier lorsqu'il s'agit de valider la pertinence du maillage.

Inversion de l'épaisseur optique Il est également possible, plutôt que d'échantillonner des libres parcours, d'échantillonner des épaisseurs optiques $\tau_i(l_i) = \int_0^{l_i} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0)dl'$, et d'inverser ces épaisseurs optiques pour remonter à un libre parcours l_i et donc à une position d'émission [Farmer et Howell, 1998, De Guilhem De Lataillade *et al.*, 2002b, Eymet *et al.*, 2005, Eymet *et al.*, 2009, De La Torre *et al.*, 2014]. Dans ce cas là, l'Eq. 4.2 peut être reformulée en :

$$r_i = \int_0^{\tau_i(l_i)} \exp(-\tau) d\tau \quad (4.5)$$

Quel que soit le champ du coefficient d'absorption, il est toujours possible d'échantillonner l'épaisseur optique qui est donnée par :

$$\tau_i(l_i) = -\ln(1 - r_i) \quad (4.6)$$

Toute la difficulté réside alors dans le fait d'inverser l'épaisseur optique pour remonter à une position d'émission. Si le champ des propriétés optiques est trop complexe, il demeure toujours possible de le discrétiser (avec les limites que cela implique) ou d'utiliser des techniques numériques d'inversion (essai-erreur, dichotomie, *etc.*). Ces dernières, bien que souvent plus précises que les approches maillées, présentent le désavantage d'être généralement très gourmandes en temps de calcul. Mais ici également, aussi faible que soit l'erreur numérique associée à ces techniques, le caractère exact des méthodes de Monte-Carlo est perdu, puisqu'il est très difficile d'estimer les biais causés par ces méthodes numériques.

4.1.3 Non-linéarité dans l'expression statistique de l'équation du transfert radiatif

Les difficultés liées aux hétérogénéités des propriétés optiques du milieu d'intérêt ne se limitent toutefois pas à l'échantillonnage des positions de collision. Si l'on approche de façon purement statistique ce problème, il serait toujours possible d'insérer une nouvelle fonction densité de probabilité $\tilde{p}_{\mathcal{L}}(l)$ qui elle, permettrait un échantillonnage aisé des libres parcours. On aurait alors comme formulation statistique :

$$\begin{aligned} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{+\infty} \tilde{p}_{\mathcal{L}}(l) dl \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0)dl'\right)}{\tilde{p}_{\mathcal{L}}(l)} L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}) \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0)dl'\right)}{\tilde{p}_{\mathcal{L}}(l)} L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

où $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0$. Toutefois, pour des champs de propriétés optiques complexes, il n'est toujours pas possible d'exprimer analytiquement l'épaisseur optique $\int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 -$

$l'\mathbf{u}_0)dl'$ (le problème a été déplacé de la densité de probabilité au poids de Monte-Carlo). Puisque cette épaisseur optique est elle-même une grandeur intégrée, il serait cependant théoriquement possible de l'estimer de façon statistique en insérant à nouveau une fonction densité de probabilité arbitraire $\tilde{p}_{\mathcal{L}'}(l')$:

$$\tau(l) = \int_0^l \tilde{p}_{\mathcal{L}'}(l') \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0)}{\tilde{p}_{\mathcal{L}'}(l')} \right] dl' = \mathbb{E} \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0)}{\tilde{p}_{\mathcal{L}'}(l')} \right] \quad (4.8)$$

Mais en pratique ce n'est pas envisageable : il serait alors nécessaire d'estimer l'épaisseur optique par une simulation de Monte-Carlo complète pour chacune des N_{mc} réalisations de l'algorithme permettant d'estimer $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Si l'on imagine que chaque algorithme (le premier estimant l'épaisseur optique et le second estimant la luminance) soit constitué de 10^6 réalisations indépendantes, il serait alors nécessaire de réaliser 10^{12} opérations, ce qui représenterait un temps de calcul prohibitif. S'il n'est pas possible de traiter statistiquement de façon simultanée ces deux termes intégraux : la luminance et l'épaisseur optique, c'est à cause de la fonction exponentielle qui introduit une *non-linéarité* dans l'expression statistique de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$:

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \mathbb{E} \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0)}{\tilde{p}_{\mathcal{L}}(l)} \exp \left(\mathbb{E} \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0)}{\tilde{p}_{\mathcal{L}'}(l')} \right] \right) \right] \\ &= \mathbb{E} [f_{NL}(\mathbb{E}[W(l')])] \end{aligned} \quad (4.9)$$

où $f_{NL}(a) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) \exp(a) / \tilde{p}_{\mathcal{L}}(l)$ est une fonction non-linéaire et $W(l') = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) / \tilde{p}_{\mathcal{L}'}(l')$. Il n'est alors pas possible d'exprimer l'Eq. 4.9 comme une seule espérance d'une variable aléatoire et donc de proposer un unique algorithme de Monte-Carlo pour traiter ce problème en milieu hétérogène (*cf.* encadré de la Sec. 3.1.2). D'un point de vue purement statistique, la difficulté rencontrée lorsque les champs de propriétés optiques ne sont pas intégrables analytiquement réside donc bien dans cette non-linéarité engendrée par la fonction exponentielle.

Dans sa thèse, J. Dauchet propose de répondre à une non-linéarité de ce type par un développement en séries entières [Dauchet, 2012]. Une telle reformulation permet ainsi de ne développer qu'un unique algorithme récursif pour traiter une expression non-linéaire (dans son cas d'étude : la productivité globale d'un photobioréacteur) tout en conservant le caractère exact des méthodes de Monte-Carlo. Dans notre cas, nous allons utiliser une autre méthode connue sous le nom d'*algorithmes à collisions nulles*. Cette technique, qui présente de grandes similitudes avec les développements en séries entières [Longo, 2002], fera l'objet des prochaines sections.

4.2 Les algorithmes à collisions nulles

4.2.1 Historique des algorithmes à collisions nulles

Les algorithmes de Monte-Carlo à collisions nulles sont apparus au début des années soixante dans deux champs disciplinaires : la physique des Plasmas et la Neutronique. Il est intéressant de constater que cette méthode a vu le jour de manière

totalelement indépendante dans chacune de ces deux communautés, menant ainsi à deux ensembles distincts de travaux qui ont semblé s'ignorer jusqu'à aujourd'hui (à l'exception de la publication [Boeuf et Marode, 1982] faisant un lien entre ces deux communautés). Aussi, cette sous-section a pour objectif de présenter succinctement cette littérature plutôt complexe de par sa duplicité et de par la variété des termes employés pour décrire une même technique.

Les algorithmes à collisions nulles ont été développés à la fin des années soixante dans le domaine de la physique des plasmas. Très utilisés dans ce champ d'application, ils permettent notamment de tenir compte des sections efficaces d'interaction dépendant de la vitesse des particules. On les rencontre dans cette communauté sous les dénominations : *Null-Collisions*, *Fictitious-Collisions*, *Pseudo-Collisions*, *Null-Events* ou encore *Fictitious-Events*. H.R. Skullerud est le premier à aborder dans [Skullerud, 1968] un Algorithme à Collisions Nulles, sans encore le dénommer ainsi, dans le but de pouvoir tirer statistiquement des "temps libres" entre deux collisions ion/molécule produites dans un gaz soumis à un champ électrique. De nombreux travaux vont alors s'ensuivre [Lin et Bardsley, 1977, Lin et Bardsley, 1978, Boeuf et Marode, 1982, Heifetz *et al.*, 1982, Andreucci, 1985, Brennan, 1991, Longo, 2002, Longo et Diomedee, 2004] visant pour la plupart à simuler les interactions entre particules chargées et molécules neutres sous l'influence d'un champ électrique. Les travaux de Skullerud ont également mené la communauté étudiant la dynamique des gaz raréfiés à s'intéresser aux Algorithmes à Collisions Nulles [Koura, 1986, Khisamutdinov et Sidorenko, 1995, Rjasanow et Wagner, 1998].

E. Woodcock a été, de son côté, à l'origine des algorithmes à collisions nulles dans le domaine de la neutronique [Woodcock *et al.*, 1965]. Cette technique, étendue d'un point de vue théorique par Coleman [Coleman, 1968], sera alors intensivement utilisée dans ce champ applicatif. Parmi les principaux travaux, on peut citer [MacMillan, 1967, Spanier, 1970, Androsenko *et al.*, 1991, Martin et Brown, 2001, Brown et Martin, 2003]. La place qu'occupera cette méthode dans cette communauté sera telle qu'elle sera implémentée nativement dans plusieurs codes de simulation de transport particulaire tels que SERPENT [Leppänen, 2007b, Leppänen, 2007a, Leppänen, 2010] ou encore MORET [Miss *et al.*, 2007, Forestier *et al.*, 2008]. Ces travaux conduiront des spécialistes d'autres domaines applicatifs tels que ceux de la synthèse d'image [Szirmay-Kalos et Tóth, 2010, Szirmay-Kalos *et al.*, 2011], de la radiothérapie [Wang *et al.*, 1997] et de la tomographie [Kawrakow et Fippel, 2000, Rehfeld et Stute, 2008, Kawrakow *et al.*, 2008, Rehfeld *et al.*, 2009, Badal et Badano, 2009, Tóth et Magdics, 2010] à s'en inspirer. On rencontre les algorithmes à collisions nulles dans la littérature associée à ces champs d'étude sous différentes dénominations : *Woodcock-Tracking*, *Delta-Tracking*, *Hole-Tracking*, *Woodcock-Scattering*, *Delta-Scattering*, *Pseudo-Scattering* ou encore *Fictitious-Scattering*.

Toutefois, bien que très usités dans de nombreux domaines d'application de la physique du transport corpusculaire, les algorithmes à collisions nulles semblent, à notre connaissance, absents de la littérature propre à l'étude du rayonnement

thermique. Aussi, ces travaux de thèse proposent, en partie, d'étendre des algorithmes à collisions nulles à ce champ applicatif.

4.2.2 Principe des algorithmes à collisions nulles

Le principe des algorithmes à collisions nulles repose sur l'addition arbitraire d'un champ positif de coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ dans le champ d'extinction réel :

$$\hat{k}_\eta = k_{a,\eta} + k_{d,\eta} + k_{n,\eta} \quad (4.10)$$

Ce champ fictif de collisions nulles doit être défini de façon à rendre le champ du nouveau coefficient d'extinction \hat{k}_η suffisamment simple pour permettre un échantillonnage aisé des libres parcours selon la fonction densité probabilité de Beer-Lambert :

$$\hat{p}_L(l) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) \exp\left(-\int_0^l \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) dl'\right) \quad (4.11)$$

Le champ du coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ peut par exemple être défini de sorte à rendre celui de \hat{k}_η uniforme (voir Fig. 4.3). En pratique, c'est le nouveau champ de coefficient d'extinction \hat{k}_η qui est défini arbitrairement, le champ de $k_{n,\eta}$ n'étant jamais explicité mais seulement défini comme $k_{n,\eta} = \hat{k}_\eta - k_{a,\eta}$.

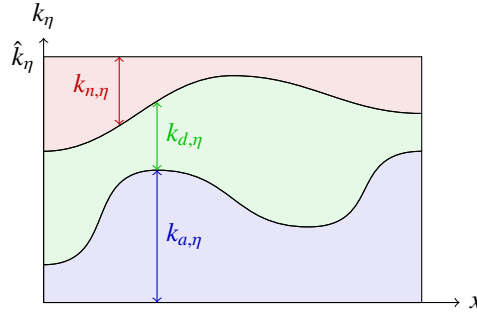


FIGURE 4.3 – Ajout d'un champ de coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ au champ d'extinction réel $k_\eta = k_{a,\eta} + k_{d,\eta}$ de sorte à rendre le champ résultant \hat{k}_η uniforme.

Toutefois, pour ne pas modifier la physique du transport, ce nouveau type de collisions fictives ne doit avoir aucun effet sur le transfert radiatif dans le milieu participant d'intérêt. Si on souhaite associer une image physique à ces collisions nulles, la seule solution consiste alors à les assimiler à des *événements de diffusion vers l'avant*, dont la fonction de phase est un Dirac (δ). Après une collision nulle, le photon initialement dans la direction \mathbf{u}_0 continue son chemin dans la même direction \mathbf{u}_0 . Leur introduction dans l'équation locale du transfert radiatif

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = & - \left[k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) \right] L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + k_{a,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) \\ & + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} p(\mathbf{u}|\mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \end{aligned} \quad (4.12)$$

modifie cette dernière en :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = & - \left[k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + k_{n,\eta}(\mathbf{x}) \right] L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + k_{a,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) \\ & + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} p(\mathbf{u}|\mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' + k_{n,\eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \end{aligned} \quad (4.13)$$

Les termes sources et puits de collision nulle se compensent alors exactement : $k_{n,\eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' = k_{n,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, prouvant ainsi, de manière formelle, que cet ajout de collisions fictives ne joue aucun rôle quant à la physique du transport de photons (cela reste vrai pour du rayonnement instationnaire). Ce ne sera qu'une fois l'équation du transfert radiatif exprimée sous sa formulation intégrale, que cette insertion de termes collisionnels fictifs prendra tout son sens et présentera sa plus-value. Ce passage à une expression intégrale fera l'objet des prochains paragraphes.

4.2.3 Approche statistique des algorithmes à collisions nulles

En guise d'illustration, reprenons le cas d'étude présenté à la [Sec. 3.3.1](#) : l'estimation de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu infini purement absorbant/émettant. La prise en compte de parois ou d'événements de diffusion n'apporte pas de difficulté particulière, comme cela va être montré par la suite. Dans ces conditions, la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ s'exprime sous forme intégrale comme :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} dl \, k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) \exp \left(- \int_0^l k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l'\mathbf{u}_0) dl' \right) \quad (4.14)$$

Ajoutons désormais arbitrairement un second type de collision à ce milieu : les collisions nulles, caractérisées par leur coefficient $k_{n,\eta}$. Puisque ces nouvelles collisions ne correspondent qu'à des événements de diffusion vers l'avant, ce cas d'étude équivaut donc à celui d'un milieu absorbant/émettant/diffusant, tel que celui présenté à la [Sec. 3.4.1](#), à une subtilité près : les événements de diffusion sont caractérisés par une fonction de phase particulière de type distribution de Dirac (aucun changement de direction n'a lieu après une collision nulle). Il est alors possible, à partir de l'[Eq. 3.66](#), d'exprimer la formulation intégrale de ce cas d'étude comme :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \int_0^\infty dl_1 \, \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1) \exp \left(- \int_0^{l_1} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_0 - l'_1 \mathbf{u}_0) dl'_1 \right) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \\ & + \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1)} \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (4.15)$$

avec $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - l_{j+1} \mathbf{u}_j$. Cette équation est bien solution de l'[Eq. 4.13](#) pour un milieu infini non-diffusant. Bien que cet ajout d'événements virtuels ne modifie aucunement la physique du transport de photons, nous sommes passés de la simple expression

intégrale 4.14 à une équation de Fredholm qu'il est possible de percevoir comme une formulation récursive et dont le terme récursif est donné par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp \left(- \int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1} \mathbf{u}_j) dl'_{j+1} \right) \times \left\{ \begin{aligned} & \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ & + \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \quad (4.16)$$

Comme la fonction de phase associée aux collisions nulles est un Dirac, il est donc possible d'intégrer analytiquement le terme récursif de diffusion vers l'avant. Il vient alors :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp \left(- \int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1} \mathbf{u}_j) dl'_{j+1} \right) \times \left\{ \begin{aligned} & \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ & + \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j) \end{aligned} \right\} \quad (4.17)$$

dont l'observable d'intérêt $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ n'est qu'un cas particulier validant $j = 0$.

Dans des considérations purement statistiques, il est possible d'exprimer l'Eq. 4.17 comme :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ & + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j) \end{aligned} \right\} \quad (4.18)$$

où $\hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp \left(- \int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1} \mathbf{u}_j) dl'_{j+1} \right)$ est la fonction densité de probabilité associée aux libres parcours d'extinction (prenant désormais en compte les absorptions/émissions et les collisions nulles), où $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})$ correspond à la probabilité qu'un photon soit émis en un point \mathbf{x}_{j+1} et $1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) = k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})$ à la probabilité qu'un photon collisionnant en \mathbf{x}_{j+1} subisse un événement de type collision nulle. À l'instar de l'Eq. 3.70, la luminance d'intérêt peut être exprimée comme l'espérance de la luminance d'équilibre aux positions d'émissions \mathbf{X}^* :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} [L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)] = \mathbb{E} [W(\mathbf{X}^*)] \quad (4.19)$$

avec

$$\mathbf{X}^* = \sum_{j=1}^{\infty} A_j \mathbf{X}_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \quad (4.20)$$

où A_q est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$ et 0 avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$.

Il est alors possible de développer à partir de l'Eq. 4.19 un algorithme de Monte-Carlo consistant à effectuer un grand nombre N_{mc} de réalisations indépendantes (indexées i), chacune composée des étapes suivantes.

ALGORITHME

1. On initialise l'indice de collision : $j = 0$
2. On échantillonne un libre parcours l_{j+1} selon la fonction densité de probabilité $\hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1})$
3. On calcule les coordonnées du point de collision : $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - l_{j+1}\mathbf{u}_j$
4. On détermine si la collision est une absorption ou une collision nulle par un test de Bernoulli. Pour cela, on tire aléatoirement et de façon uniforme un nombre r_{j+1} dans $[0, 1]$
 - 4a. Si $r_{j+1} < \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})$, on considère que la collision est une absorption. Le poids de la réalisation est calculé : $w_i = L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1})$ et l'algorithme s'arrête ici, on peut passer à une nouvelle réalisation.
 - 4b. Si $r_{j+1} > \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})$, on considère que l'on est face à une collision nulle. Puisque les collisions nulles correspondent à des événements de diffusion vers l'avant on va boucler à l'étape 2 avec $j \equiv j + 1$ et ainsi échantillonner un nouveau libre parcours à partir du point \mathbf{x}_{j+1} dans la même direction $\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j$. Cette récursion va alors se poursuivre jusqu'à ce qu'un événement d'absorption soit rencontré.

Les images physiques associées sont identiques à celles relatives à un milieu absorbant/émettant/diffusant : les photons sont suivis depuis le point sonde \mathbf{x}_0 dans la direction $-\mathbf{u}_0$. À chaque position de collision, ces photons ont une probabilité d'être absorbés ou de diffuser vers l'avant. Ces images sont intuitivement satisfaisantes, puisqu'en faisant artificiellement passer le coefficient d'extinction de $k_{a,\eta}$ à $\hat{k}_\eta > k_{a,\eta}$, les libres parcours d'extinction sont statistiquement sous-estimés. Cette réduction est alors compensée par les événements de diffusion vers l'avant que constituent les collisions nulles.

On perçoit alors l'avantage qu'apporte cet ajout arbitraire de collisions nulles : elles peuvent être choisies de sorte à rendre l'échantillonnage des libres parcours selon $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j)$ analytiquement possible. La non-linéarité associée à l'exponentielle de la loi de Beer-Lambert et les difficultés liées à l'estimation de l'épaisseur optique ont donc disparu au profit d'une formulation récursive. Les algorithmes à collisions nulles ne constituent alors qu'une alternative possible à l'échantillonnage des libres parcours d'absorption (ou d'extinction si la diffusion avait été prise en compte), comme en atteste l'Eq. 4.19.

Ainsi, dès lors qu'un champ de \hat{k} est défini et majore le champ réel du coefficient d'extinction, les variations des propriétés du milieu ne posent plus de problème de traitement numérique. On s'affranchit ainsi de techniques d'inversion complexes et d'une discrétisation spatiale des propriétés qui auraient conduit à des erreurs non

maîtrisées. L'estimation d'une observable par cette approche a alors une valeur de solution de référence, dans le sens où la méthode elle-même n'entraîne aucun biais numérique. Le fait qu'aucun maillage ne soit requis par la méthode elle-même ne signifie toutefois pas que les champs de propriétés doivent être décrits de façon analytique. Tout champ de propriétés peut être rigoureusement accepté en entrée de l'algorithme :

- Pour des cas académiques ou résultant de modèles théoriques, il est possible de décrire les propriétés optiques du milieu par des champs analytiques. Dans ce cas, l'estimation de l'observable d'intérêt sera non biaisée et strictement conforme au modèle de propriétés considéré. Ce type de champs sera privilégié dans les travaux présentés dans le présent manuscrit pour faciliter la mise en œuvre numérique et les études paramétriques.
- En pratique, les champs de propriétés (température, pression et concentrations) sont généralement issus de simulations basées sur des approches de type éléments/volumes discrets ou de mesures expérimentales. Ces derniers, décrits de façon discrète, sont communément fournis avec un schéma d'interpolation fidèle à la physique en présence. Ici aussi, leur utilisation en entrée des algorithmes à collisions nulles conduira à une estimation non biaisée et non approchée de l'observable d'intérêt, sans nécessiter la production d'un maillage supplémentaire. De plus, contrairement aux méthodes de Monte-Carlo maillées, tous les schémas d'interpolation pourront être acceptés et traités de façon rigoureuse. Seule la validité des champs maillés de propriétés et du modèle d'interpolation utilisés en entrée de l'algorithme pourront avoir une incidence sur la qualité des estimations.

4.2.4 Vers des coefficients de collision nulle négatifs

Dans la formulation statistique présentée précédemment, la détermination du type de collision (absorption ou collision nulle) se fait par l'introduction d'une probabilité d'absorption $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)$. Cette probabilité n'a de sens que si elle est comprise entre 0 et 1 et donc si le champ de \hat{k}_η majore en tout point le champ du coefficient d'extinction réel k_η (ici identique à celui du coefficient d'absorption $k_{a,\eta}$ puisque la diffusion n'est pas prise en compte). En d'autres termes, \mathcal{P}_a n'a de sens que si le coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ est positif en tout point. L'algorithme présenté précédemment est donc valable, si et seulement si, cette condition est respectée. Dans le cas contraire, l'algorithme - tel qu'il est présenté à la [Sec. 4.2.3](#) - produira bien une estimation de l'observable désirée, mais celle-ci sera biaisée.

Or, dans beaucoup de cas pratiques, il est très difficile de déterminer à l'avance la valeur maximale que peut prendre localement le coefficient d'extinction. En effet, il est fréquent que les propriétés du milieu soient calculées au cours de la simulation. Il est également courant que les champs de propriétés optiques soient discrétisés (découlant de maillages obtenus lors de calculs de CFD) et fournis avec un schéma d'interpolation donné. Cette interpolation est susceptible de décrire des champs dépassant localement les valeurs discrètes d'origine. Il est ainsi vraiment délicat

de définir avec certitude un champ de \hat{k}_η qui majore strictement le champ réel de coefficient d'absorption (ou d'extinction). Cette condition nécessaire représente ainsi une importante contrainte lors de l'implémentation d'algorithme à collisions nulles.

Cette limite peut cependant être surmontée en observant que le choix des probabilités d'absorption n'est pas contraint. Dans la littérature, seule l'expression $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)$ est rencontrée du fait de sa nature intuitive, relative aux images cinétiques des collisions nulles (diffusion vers l'avant). Cependant, rien n'empêche de définir de façon arbitraire une nouvelle probabilité d'absorption $\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_j)$, qui, elle, sera toujours comprise entre 0 et 1, quelle que soit la valeur de \hat{k}_η ou de $k_{n,\eta}$. L'Eq. 4.18 est alors reformulée en :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) \left\{ \begin{aligned} & \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})}{\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ & + \left(1 - \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1})\right) \frac{1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})}{1 - \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j) \end{aligned} \right\} \quad (4.21)$$

La luminance d'intérêt correspond alors à l'espérance d'une nouvelle variable aléatoire :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} \left[\sum_{m=1}^{+\infty} \tilde{A}_m \frac{\mathcal{P}_a(\mathbf{X}_m)}{\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{X}_m)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_m) \prod_{q=1}^{m-1} \left(1 - \tilde{A}_q\right) \frac{1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{X}_q)}{1 - \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{X}_q)} \right] = \mathbb{E}[W] \quad (4.22)$$

où \tilde{A}_q est une variable aléatoire associée à la q -ième collision valant 1 avec une probabilité $\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{X}_q)$ et 0 sinon. Ici encore, le choix de la probabilité $\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{X}_q)$ demeure totalement arbitraire. Nous proposons le choix suivant :

$$\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_j) = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j) + |\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) - k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)|} = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|} \quad (4.23)$$

qui présente l'avantage d'être égal à la probabilité originelle $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)$ lorsque le coefficient $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)$ majore le coefficient d'absorption (pour un coefficient positif de collision nulle). Lorsque des coefficients de collision nulle négatifs seront rencontrés, la structure statistique restera identique, seule l'expression de la variable aléatoire W sera altérée. On garde ainsi la structure et le formalisme initiaux des algorithmes à collisions nulles tout en se prémunissant d'éventuelles erreurs dues à une mauvaise définition d'un champ majorant. Cette introduction d'une nouvelle probabilité arbitraire $\tilde{\mathcal{P}}_a$ n'entraîne alors qu'une révision mineure des algorithmes à collisions nulles standards. Mais désormais, tout champ de \hat{k}_η peut être, en théorie, accepté.

Toutefois, une attention particulière doit être portée aux positions \mathbf{x}_j pour lesquelles le coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)$ est négatif à cause du terme $\beta_q = \frac{1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{X}_q)}{1 - \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{X}_q)}$ dans l'Eq. 4.22. En effet, l'algorithme de Monte-Carlo consiste à produire plusieurs échantillons w_i de la variable aléatoire W (cf. Eq. 4.22).

Lorsqu'aucune collision nulle de coefficient négatif n'est rencontrée, le terme β_q vaut 1, l'échantillon w_i est alors égal à $L^{eq}(\mathbf{x}_m)$ où \mathbf{x}_m correspond à la position d'émission. Si pendant la réalisation, au moins une collision nulle de coefficient négatif a lieu, la valeur absolue du terme β_q sera strictement supérieure à 1 et son signe alternera à chaque fois qu'une collision en \mathbf{x} validant $h_{n,\eta}(\mathbf{x}) < 0$ sera rencontrée. Dans la mesure où les termes de β_q sont inclus dans un produit, ils peuvent être à l'origine d'une forte augmentation de variance de l'estimation affichée par l'algorithme de Monte-Carlo (à cause de l'alternance de signe et de la divergence qu'impliquerait le produit de nombres dont la valeur absolue est supérieure à 1).

On devine alors que le choix du champ de \hat{k}_η ne sera pas anodin :

- il doit être suffisamment simple pour permettre un échantillonnage rapide des libres parcours.
- il doit être le plus proche possible de celui du coefficient d'absorption. En effet, plus il sera élevé et plus il y aura de collisions nulles, sans réel intérêt pour la simulation elle-même, mais sources d'une augmentation du temps de calcul.
- il doit, autant que possible, majorer le champ du coefficient d'absorption pour éviter une variance importante de l'estimation de Monte-Carlo.

La proposition faite dans ce paragraphe est donc à la fois importante, puisqu'elle autorise désormais une définition imparfaite du champ majorant \hat{k}_η sans entraîner aucun biais, mais aussi limitée puisque, si les régions dans lesquelles $k_{n,\eta} < 0$ sont trop représentées, une augmentation conséquente de l'erreur relative est engendrée.

4.3 Mise en application et étude paramétrique

Pour étudier l'influence qu'a le choix du champ de coefficient d'extinction arbitraire \hat{k}_η sur le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo, une étude paramétrique est ici proposée pour une configuration académique. Cette influence sera ainsi analysée et discutée pour une configuration relativement complexe (absorption, émission, diffusion et parois réfléchissantes), pour différentes épaisseurs optiques d'absorption et de diffusion et pour différentes variantes algorithmiques (traitement statistique ou déterministe du type de collisions).

4.3.1 Description du cas d'étude

4.3.1.1 Géométrie et champs de propriétés considérés

Considérons, dans le cadre de cette étude, un cube de côté $2 \times D$ partiellement réfléchissant, d'émissivité ε et de température T uniformes, dont le centre correspond à l'origine du repère cartésien (voir Fig. 4.4). Considérons également qu'à l'intérieur de ce cube est présent un milieu hétérogène émettant, absorbant et diffusant le rayonnement (selon une fonction de phase de type Henyey-Greenstein de paramètre d'asymétrie uniforme g).

Les champs hétérogènes des propriétés du milieu (coefficients d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$, de diffusion $k_{d,\eta}(\mathbf{x})$, et luminance d'équilibre $L_\eta^{eq}(\mathbf{x})$) sont définis de façon analytique

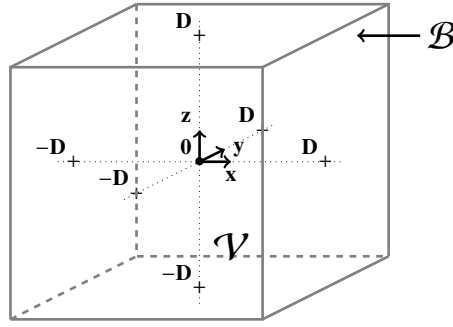


FIGURE 4.4 – La géométrie considérée correspond à un cube de côté $2 \times D$ partiellement réfléchissant (d'émissivité ε et de température T uniformes) dont le centre correspond à l'origine du repère cartésien. À l'intérieur de ce cube est présent un milieu hétérogène émettant, absorbant et diffusant le rayonnement (selon une fonction de phase de type Henyey-Greenstein).

afin d'approcher la géométrie d'une flamme axisymétrique dans une chambre de combustion cubique (voir Fig. 4.5). Chacun d'entre-eux est défini en fonction d'une valeur maximale, respectivement $k_{a,\eta}^{\max}$, $k_{d,\eta}^{\max}$ et $L_{\eta}^{eq,\max}$, qui permettront par la suite de réaliser une analyse paramétrique adimensionnée. Mises à part ces valeurs maximales, les expressions de ces champs sont identiques. Elles sont données ci-après pour $\mathbf{x} = [x, y, z]$:

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = k_{a,\eta}^{\max} \left(\frac{D-x}{2D} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2 + z^2}{2D^2}} \right) \quad (4.24)$$

$$k_{d,\eta}(\mathbf{x}) = k_{d,\eta}^{\max} \left(\frac{D-x}{2D} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2 + z^2}{2D^2}} \right) \quad (4.25)$$

$$L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}) = L_{\eta}^{eq,\max} \left(\frac{D-x}{2D} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2 + z^2}{2D^2}} \right) \quad (4.26)$$

et sont illustrées à la Fig. 4.5. Leur valeur maximale est donc atteinte au point $\mathbf{x}_{\max} = [-D, 0, 0]$.

Pour faciliter l'analyse, le champ de $\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x})$ sera défini comme uniforme, assurant également un échantillonnage aisé des libres parcours. Comme les coefficients d'absorption et de diffusion prennent tous deux leur valeur maximale en $\mathbf{x} = [-D, 0, 0]$, le coefficient d'extinction maximal est atteint en ce point et donné par $k_{\eta}^{\max} = k_{a,\eta}^{\max}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}^{\max}(\mathbf{x})$. La grandeur adimensionnelle

$$\rho = \frac{\hat{k}_{\eta}}{k_{\eta}^{\max}} \quad (4.27)$$

nous renseigne alors sur la présence ou non de zones dans lesquelles le coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ serait négatif. Si $\rho > 1$, le champ de \hat{k}_{η} est positif en tout point de l'enceinte ($k_{n,\eta} > 0$). Dans le cas contraire : $\rho < 1$, le coefficient de collision nulle sera

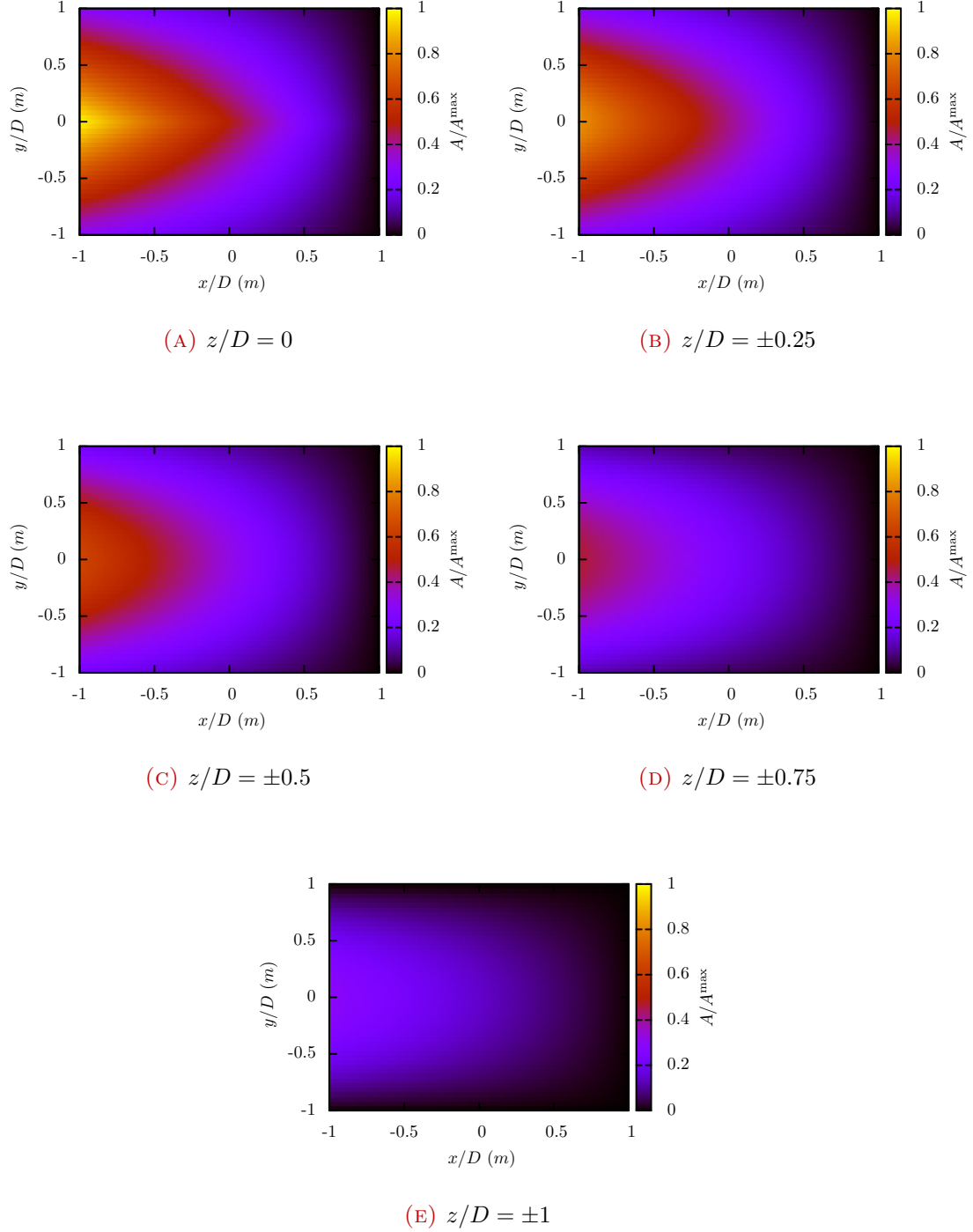


FIGURE 4.5 – Représentation adimensionnée des champs de coefficient d’absorption, de diffusion et de luminance d’équilibre pour différentes altitudes ($z = 0$, $z = \pm 0.25D$, $z = \pm 0.5D$, $z = \pm 0.75D$ et $z = \pm D$). Chacun d’entre eux est défini par la même expression : $A(\mathbf{x}) = A^{\max}(D - x)/(2D)(1 - \sqrt{(y^2 + z^2)/(2D^2)})$ où les valeurs génériques $A(\mathbf{x})$ et A^{\max} peuvent représenter respectivement $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ et $k_{a,\eta}^{\max}$; $k_{d,\eta}(\mathbf{x})$ et $k_{d,\eta}^{\max}$ ou encore $L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x})$ et $L_{\eta}^{eq,\max}$.

négatif, au moins localement. La zone la plus critique étant celle proche du point $[-D, 0, 0]$.

4.3.1.2 Estimation d'un bilan radiatif monochromatique

Dans le cadre de cette étude, on souhaite étudier le bilan radiatif monochromatique $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$, c'est-à-dire la différence entre les puissances radiatives absorbée et émise localement en \mathbf{x}_0 . Il s'exprime, en régime stationnaire et sous l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local, comme :

$$\begin{aligned} S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0) &= \int_{4\pi} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) \left[L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) - L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) \right] d\mathbf{u}_0 \\ &= k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) \left[\int_{4\pi} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 - 4\pi L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

Compte tenu des champs de propriétés retenus, le bilan radiatif monochromatique est proportionnel à $L_\eta^{eq,\max}$ et les seuls paramètres adimensionnels restants sont ρ , les épaisseurs optiques d'absorption $k_{a,\eta}^{\max} D$ et de diffusion $k_{d,\eta}^{\max} D$, le paramètre d'asymétrie g et l'émissivité ε . Outre l'intégrale directionnelle sur 4π , toute la difficulté de cette estimation réside dans le calcul de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ qui va désormais devoir tenir compte des événements de diffusion ainsi que de ceux d'émission et de réflexion aux parois. *Sans ajout de collisions nulles*, il est possible d'exprimer cette luminance à partir de l'Eq. 4.28 sous une forme récursive :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) &= \int_0^\infty dl_{j+1} k_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp \left(- \int_0^{l_{j+1}} k_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1} \mathbf{u}_j) dl'_1 \right) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ &+ (1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \\ &+ \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{aligned} &\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{k_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ &+ \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{k_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (4.29)$$

L'Eq. 4.28 peut alors être reformulée de façon statistique, avec l'insertion d'une fonction densité de probabilité des directions d'émission $p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0)$ arbitraire, en :

$$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0) k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) \left[\int_{4\pi} p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) d\mathbf{u}_0 - 4\pi L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) \right] \quad (4.30)$$

où le terme récursif $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ est donné par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.31)$$

avec $\mathcal{P}_e(\mathbf{x}_w) = \varepsilon(\mathbf{x}_w)$ et $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}) = k_{a,\eta}(\mathbf{x})/k_\eta(\mathbf{x})$. Le bilan radiatif correspond alors à l'espérance de la variable aléatoire $W(\mathbf{X}^*)$ décrite ci-dessous :

$$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0) = \mathbb{E} \left[k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) \left(\frac{L_\eta^{eq}(\mathbf{X}^*)}{p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0)} - 4\pi L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) \right) \right] = \mathbb{E} [W(\mathbf{X}^*)] \quad (4.32)$$

où la variable aléatoire \mathbf{X}^* correspond à la position d'émission définie (comme à la [Sec. 3.4.4](#)) par :

$$\mathbf{X}^* = \sum_{j=1}^{\infty} \left[\mathcal{H}(X_j \in \mathcal{V}) A_j X_j + \mathcal{H}(X_j \notin \mathcal{V}) E_j X_{w,j} \right] \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q - E_q) \quad (4.33)$$

avec A_j une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_j)$, 0 sinon, et E_j une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j})$, 0 sinon.

L'algorithme de Monte-Carlo réciproque correspondant consiste donc à échantillonner la variable aléatoire $W(\mathbf{X}^*)$ un grand nombre de fois. Chacune de ces réalisations indépendantes consiste à échantillonner une direction \mathbf{u}_0 selon $p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0)$ et un libre parcours l_1 depuis la position d'intérêt \mathbf{x}_0 , dans la direction $-\mathbf{u}_0$, selon $p_{\mathcal{L}_1}(l_1)$. Si \mathbf{x}_1 n'appartient pas au milieu \mathcal{V} , la collision a alors lieu à la frontière en $\mathbf{x}_{w,1}$ ¹, il y a une probabilité $\mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,1})$ que le photon soit absorbé en ce point, mettant fin à la réalisation (dans ce cas, l'échantillon de la variable aléatoire $W(\mathbf{X}^*)$ est donné par $w_i = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) [L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,1})/p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) - 4\pi L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0)]$); sinon le photon est réfléchi, une direction \mathbf{u}_1 et un nouveau libre parcours l_2 sont échantillonnés respectivement selon $\psi(\mathbf{x}_{w,1}, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1)$ et $p_{\mathcal{L}_2}(l_2)$, la réalisation se poursuit alors jusqu'à ce qu'une position d'absorption soit identifiée. La collision suite à l'échantillonnage du libre parcours l_1 peut également avoir lieu dans le milieu \mathcal{V} en \mathbf{x}_1 . Dans ce cas, il y a une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)$ que le photon soit absorbé en ce point, mettant fin à la réalisation (le poids de Monte-Carlo est alors donné par $w_i = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) [L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1)/p_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{u}_0) - 4\pi L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0)]$); sinon, le photon est diffusé, une direction \mathbf{u}_1 et un nouveau libre parcours l_2 sont alors échantillonnés respectivement selon $\phi(\mathbf{x}_{w,1}, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1)$ et $p_{\mathcal{L}_2}(l_2)$, la réalisation se poursuit alors jusqu'à ce qu'une position d'absorption soit identifiée. Les images

1. $\mathbf{x}_{w,j+1}$ est définie comme le premier point d'intersection entre la frontière \mathcal{B} et la demi droite définie par le point \mathbf{x}_j et la direction $-\mathbf{u}_j$.

physiques associées à cet algorithme sont illustrées à la Fig. 4.6.

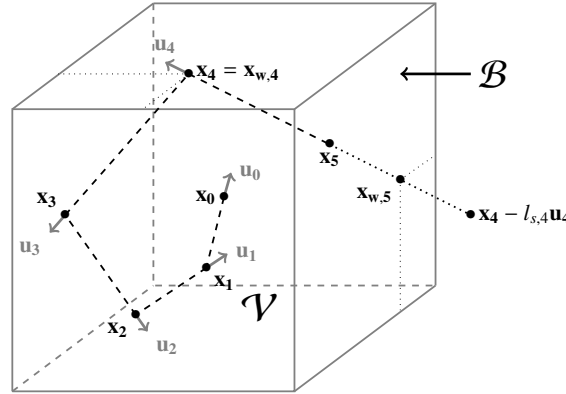


FIGURE 4.6 – Bilan radiatif en \mathbf{x}_0 sans ajout de collisions nulles. L'algorithme de Monte-Carlo consiste à suivre des photons depuis \mathbf{x}_0 dans l'ensemble des directions \mathbf{u}_0 , jusqu'à ce qu'une position d'émission par le milieu (voir \mathbf{x}_5) ou par la paroi soit identifiée (voir $\mathbf{x}_{w,5}$). Le long du chemin optique d'intérêt, les photons peuvent être diffusés (voir \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 ou \mathbf{x}_3) ou réfléchis à la paroi (voir \mathbf{x}_4).

4.3.2 Traitement statistique du type de collision

4.3.2.1 Champ \hat{k} majorant le champ du coefficient d'extinction

Toutefois, cet algorithme présuppose que les libres parcours peuvent être échantillonnés. Si tel n'est pas le cas, si les champs de $k_{a,\eta}$ et de $k_{d,\eta}$ sont trop complexes pour permettre un calcul analytique de l'épaisseur optique, il peut être intéressant d'ajouter un troisième type de collision : les collisions nulles. La variable aléatoire \mathcal{L}_{j+1} , associée aux libres parcours, sera alors définie selon la densité de probabilité

$$\hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l_{j+1}\mathbf{u}_k) \exp\left(-\int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1}\mathbf{u}_j) dl'_{j+1}\right) \quad (4.34)$$

où $\hat{k}_\eta = k_{a,\eta} + k_{d,\eta} + k_{n,\eta}$. Les conditions aux frontières ne seront pas modifiées mais une nouvelle probabilité de collision nulle \mathcal{P}_n fera son apparition. Trois types de collisions pourront alors être rencontrés dans le milieu :

- des émissions (ou des absorptions, selon que l'on se place dans une description directe ou réciproque), de probabilité $\mathcal{P}_a = k_{a,\eta}/\hat{k}_\eta$,
- des diffusions, de probabilité $\mathcal{P}_d = k_{d,\eta}/\hat{k}_\eta$,
- des collisions nulles, de probabilité $\mathcal{P}_n = k_{n,\eta}/\hat{k}_\eta$,

Si l'on fait comme hypothèse, dans un premier temps, que le champ de \hat{k}_η majore le champ du coefficient d'extinction maximal $k_\eta^{\max} = k_{a,\eta}^{\max} + k_{d,\eta}^{\max}$, les valeurs de \mathcal{P}_a , \mathcal{P}_d et \mathcal{P}_n sont comprises entre 0 et 1 et leur somme vaut bien 1 pour tout point \mathbf{x} . L'ajout de collisions nulles dans l'Eq. 4.30 n'entraîne pas de changement visible,

seule l'expression récursive de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ est modifiée :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + \mathcal{P}_d(\mathbf{x}_{j+1}) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \\ + \mathcal{P}_n(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.35)$$

L'expression de ce bilan radiatif comme l'espérance d'une variable aléatoire $W(\mathbf{X}^*)$ demeure identique à celle que l'on avait avant l'ajout de collisions nulles (voir Eq. 4.32). Même si l'expression de la variable aléatoire \mathbf{X}^* , associée aux positions d'émission, reste inchangée, \mathbf{X}^* est désormais définie par $\hat{p}_{\mathcal{L}}(l)$ et tient alors compte d'éventuelles collisions nulles. Cette formulation intégrale mène alors à l'algorithme présenté à la Fig. 4.7.

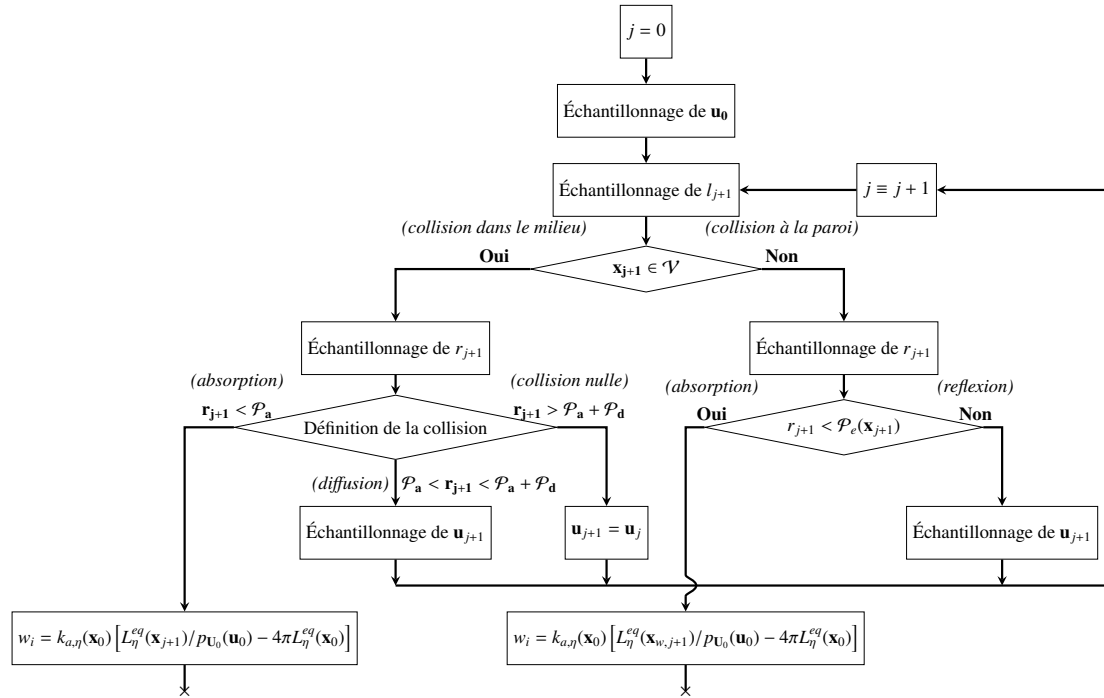


FIGURE 4.7 – Algorithme à collisions nulles usuel permettant d'estimer $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ par un algorithme à collisions nulles usuel.

4.3.2.2 Validation de l'algorithme à collisions nulles pour différentes épaisseurs optiques

Dans l'optique de valider l'algorithme présenté à la Fig. 4.7, ce dernier a été comparé à un algorithme standard de Monte-Carlo bien maîtrisé, formulé en épaisseur optique et dans lequel l'inversion des épaisseurs optiques est réalisée en ajustant de façon très précise le champ du coefficient d'extinction, le long d'une ligne de visée, par une décomposition en splines cubiques (inversible analytiquement). Pour cette validation, le bilan radiatif monochromatique a été calculé par les deux algorithmes en deux points du milieu participant d'intérêt : le centre du cube $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et le point où les épaisseurs optiques sont maximales $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ (voir Fig. 4.4)². Le champ de \hat{k}_η est défini de façon uniforme comme égal à $k_{a,\eta}^{\max} + k_{d,\eta}^{\max}$ ($\rho = 1$). Ainsi, excepté en $\mathbf{x} = [-D, 0, 0]$ où il est nul, le champ du coefficient de collision nulle est toujours strictement positif. En première approximation, on considère également les parois comme noires ($\varepsilon = 1$) de température $T_w = 0K$ et le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase d'Heney-Greenstein égal à 0 (fonction de phase isotrope).

Les tables 4.1 et 4.2 rassemblent les résultats obtenus respectivement pour $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par les deux algorithmes et pour différentes épaisseurs optiques maximales d'absorption $k_{a,\eta}^{\max} D$ et de diffusion $k_{d,\eta}^{\max} D$. Pour chacun de ces deux algorithmes, l'estimation du bilan radiatif ainsi que son écart-type adimensionnalisés sont donnés. Ceux-ci sont respectivement définis par $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)/[4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0)]$ et $\sigma/[4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0)]$. De plus, pour l'algorithme à collisions nulles, les temps de calcul pour 10^6 réalisations indépendantes (noté t) et pour obtenir un écart-type relatif de 1% (noté $t_{1\%}$) sont également fournis³. La simulation a été effectuée avec un processeur "Intel Core i5 - 2.4GHz" sans parallélisation.

Les estimations du bilan radiatif par ces deux algorithmes concordent parfaitement. Les erreurs relatives indiquent également un bon niveau de convergence de l'algorithme à collisions nulles quelles que soient les épaisseurs optiques considérées (l'erreur relative $e = \sigma/S_{r,\eta}$ obtenue après 10^6 réalisations est inférieure à 0.2% dans tous les cas). Enfin, les temps de calcul relevés pour l'algorithme à collisions nulles sont du même ordre de grandeurs que ceux que l'on rencontrerait avec un algorithme standard de Monte-Carlo dans lequel les propriétés du milieu seraient uniformes. L'ajout de collisions nulles, sans aucun effet sur la précision du calcul, semble donc n'avoir eu qu'un effet modéré sur ces temps de calcul.

4.3.2.3 Prise en compte de coefficients de collision nulle négatifs

Jusqu'à présent, l'algorithme proposé ne permettait que de définir un coefficient \hat{k}_η supérieur en tous points au coefficient d'extinction réel k_η . Il est possible, comme

2. Le choix d'estimer le bilan radiatif en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ est motivé par le fait que lorsque l'on étendra l'algorithme à collisions nulles aux valeurs négatives de $k_{n,\eta}$, ce sera en ce point que le $k_{n,\eta}$ sera le plus faible.

3. Du fait de la lourdeur de l'approche numérique d'inversion utilisée dans la méthode de validation, les temps de calcul relatifs à cet algorithme (n'apportant pas de réel élément de comparaison) ne sont pas affichés.

Epaiss. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations)				Algo. de validation	
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ	t	$t_{1\%}$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ
		$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$			$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$
0.1	0.1	-0.483813	8.52E-05	2.43	7.54E-04	-0.483717	2.34E-05
0.1	1	-0.482031	8.97E-05	7.92	2.74E-03	-0.481921	2.91E-05
0.1	3	-0.477997	9.90E-05	24.25	1.04E-02	-0.477883	4.04E-05
0.1	10	-0.463027	1.27E-04	122.69	9.23E-02	-0.463068	7.69E-05
1	0.1	-0.366086	2.09E-04	2.94	9.58E-03	-0.365971	2.18E-04
1	1	-0.356169	2.13E-04	7.43	2.66E-02	-0.356353	2.51E-04
1	3	-0.335850	2.20E-04	19.2	8.24E-02	-0.335928	3.16E-04
1	10	-0.277205	2.28E-04	76.39	5.17E-01	-0.27683	4.84E-04
3	0.1	-0.218989	2.21E-04	3.48	3.54E-02	-0.218942	5.62E-04
3	1	-0.209261	2.18E-04	6.4	6.95E-02	-0.209529	6.01E-04
3	3	-0.190256	2.10E-04	13.63	1.66E-01	-0.190141	6.84E-04
3	10	-0.144073	1.84E-04	41.38	6.75E-01	-0.143501	8.85E-04
10	0.1	-0.071271	1.19E-04	3.49	9.73E-02	-0.07137	1.28E-03
10	1	-0.068662	1.15E-04	4.66	1.31E-01	-0.068854	1.31E-03
10	3	-0.063501	1.07E-04	7.29	2.07E-01	-0.063369	1.36E-03
10	10	-0.050674	8.49E-05	16.23	4.56E-01	-0.050674	1.47E-03

TABLE 4.1 – Estimations, écarts-types et temps de calcul obtenus par l’algorithme à collisions nulles pour 10^6 réalisations en $\mathbf{x} = [0, 0, 0]$ pour plusieurs valeurs d’épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion. Les résultats sont comparés à ceux obtenus à partir d’un algorithme de Monte-Carlo faisant office de méthode de référence.

Epaiss. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations)				Algo. de validation	
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ	t	$t_{1\%}$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ
		$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$			$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\overline{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$
0.1	0.1	-0.977296	1.27E-04	2.24	3.78E-04	-0.977336	2.64E-05
0.1	1	-0.97683	1.29E-04	6.18	1.08E-03	-0.976679	2.86E-05
0.1	3	-0.975682	1.33E-04	15.3	2.84E-03	-0.975767	3.30E-05
0.1	10	-0.974828	1.37E-04	44.9	8.87E-03	-0.974733	4.47E-05
1	0.1	-0.822495	3.24E-04	2.38	3.69E-03	-0.822111	2.40E-04
1	1	-0.822446	3.26E-04	5.13	8.06E-03	-0.821846	2.47E-04
1	3	-0.823933	3.29E-04	10.75	1.71E-02	-0.823994	2.60E-04
1	10	-0.83941	3.27E-04	26.32	3.99E-02	-0.839533	2.73E-04
3	0.1	-0.658358	4.07E-04	2.22	8.48E-03	-0.657242	5.54E-04
3	1	-0.66479	4.09E-04	3.73	1.41E-02	-0.664704	5.45E-04
3	3	-0.67959	4.12E-04	6.67	2.45E-02	-0.679703	5.27E-04
3	10	-0.72422	4.10E-04	14.49	4.64E-02	-0.722886	4.73E-04
10	0.1	-0.544282	4.62E-04	1.98	1.43E-02	-0.5438	8.46E-04
10	1	-0.551703	4.63E-04	2.47	1.74E-02	-0.551153	8.29E-04
10	3	-0.567704	4.65E-04	3.54	2.38E-02	-0.567366	7.90E-04
10	10	-0.61077	4.65E-04	6.76	3.92E-02	-0.609865	7.00E-04

TABLE 4.2 – Estimations, écarts-types et temps de calcul obtenus par l’algorithme à collisions nulles pour 10^6 réalisations en $\mathbf{x} = [-D, 0, 0]$ pour plusieurs valeurs d’épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion. Les résultats sont comparés à ceux obtenus à partir d’un algorithme de Monte-Carlo faisant office de méthode de référence.

proposé à la [Sec. 4.2.4](#) de définir de nouvelles probabilités pour s'affranchir de cette contrainte. Dans la continuité de la probabilité d'émission/absorption proposée à la [Sec. 4.2.4](#) pour un cas purement absorbant/émettant, nous proposons ici les probabilités suivantes pour tenir compte de la diffusion :

- $\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}) = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x})}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}$ comme probabilité d'émission/absorption,
- $\tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}) = \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x})}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}$ comme probabilité de diffusion,
- $\tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}) = \frac{|k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}$ comme probabilité de collision nulle.

Ainsi quel que soit le champ de \hat{k} (majorant ou non), ces probabilités sont bien comprises entre 0 et 1 et leur somme vaut 1.

Ce changement de probabilités modifie sensiblement l'expression récursive de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ présente dans le bilan radiatif $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$. Leur introduction dans l'[Eq. 4.35](#) conduit alors à :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \\ + \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.36)$$

L'expression du bilan radiatif $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ sous forme d'espérance est alors substantiellement modifiée. Il vient :

$$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0) = \mathbb{E} \left[\begin{array}{l} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) \sum_{j=1}^\infty \left[A_{e,j} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j}) + A_{a,j} \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) \right] \\ \times \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_{e,q} - A_{a,q}) \left(A_{r,q} + A_{d,q} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_q)} + A_{n,q} \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_q)} \right) \\ - 4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) \end{array} \right] \quad (4.37)$$

où les variables aléatoires :

- $A_{e,j}$ vaut 1 si une émission a lieu en $\mathbf{x}_{w,j}$, 0 sinon.
- $A_{a,j}$ vaut 1 si une absorption a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.
- $A_{r,j}$ vaut 1 si une réflexion a lieu en $\mathbf{x}_{w,j}$, 0 sinon.
- $A_{d,j}$ vaut 1 si une diffusion a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.

- $A_{n,j}$ vaut 1 si une collision nulle a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.

L'algorithme de Monte-Carlo correspondant est donné à la Fig. 4.8

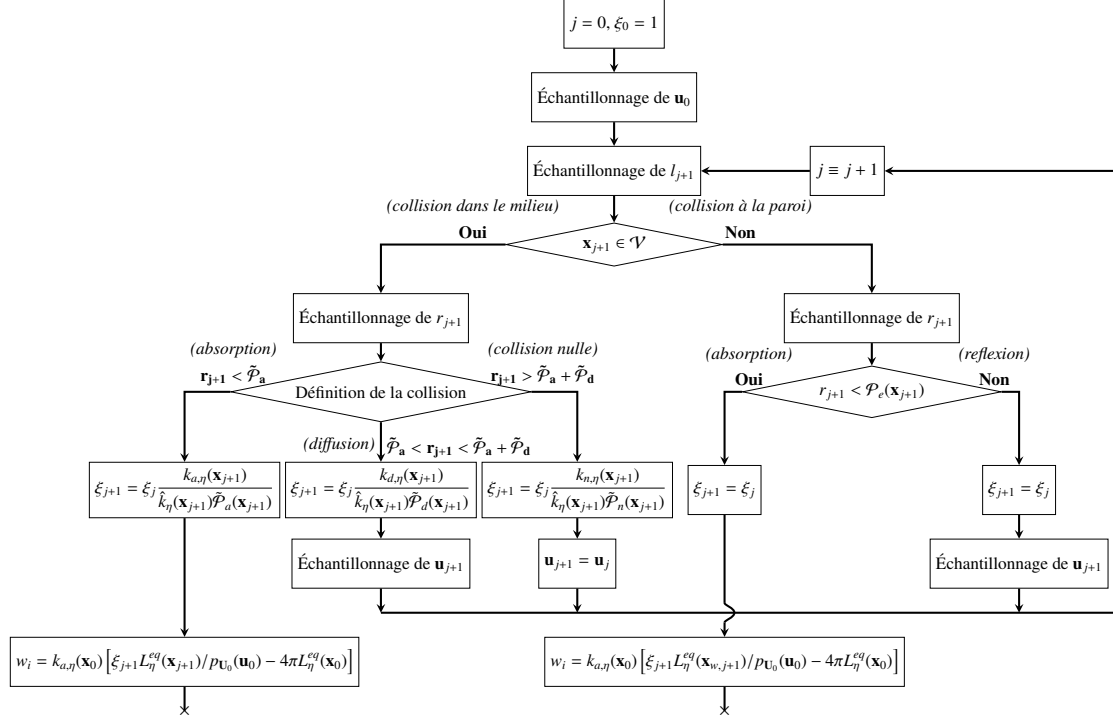


FIGURE 4.8 – Extension de l'algorithme de la Fig. 4.7, permettant d'estimer $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$, aux coefficients négatifs de collision nulle. Trois nouvelles probabilités d'absorption \tilde{P}_a , de diffusion \tilde{P}_d et de collisions nulles \tilde{P}_n ont été introduites. Les poids de Monte-Carlo w_i résultant de ce changement sont modifiés en conséquence.

4.3.2.4 Comportement numérique en fonction des valeurs du coefficient de collision nulle

Il devient ainsi possible de réaliser en toute généralité une étude de l'effet du \hat{k}_η sur le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo. Pour mener à bien cette analyse, plusieurs calculs du bilan radiatif monochromatique ont été effectués, à partir de l'algorithme de la Fig. 4.8, pour plusieurs valeurs de $\rho = \hat{k}_\eta/k_\eta^{\max}$ allant de $\rho = 0.5$ (où \hat{k}_η ne majore que localement le coefficient d'extinction réel k_η) à $\rho = 5$ (où \hat{k}_η majore en tout point et très largement k_η). Les Fig. 4.9, Fig. 4.10 et Fig. 4.11 décrivent respectivement les évolutions de l'erreur relative, du temps de calcul pour 10^6 réalisations et du temps de calcul pour obtenir une erreur relative de 1% en fonction de ρ , pour différentes épaisseurs optiques et deux points d'intérêts : $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$.

Pour $\rho > 1$, l'écart-type de l'estimation du bilan radiatif monochromatique est indépendant du coefficient de collision nulle (voir Fig. 4.9). En effet, les algorithmes à collisions nulles ne constituent qu'un artefact statistique et numérique permettant

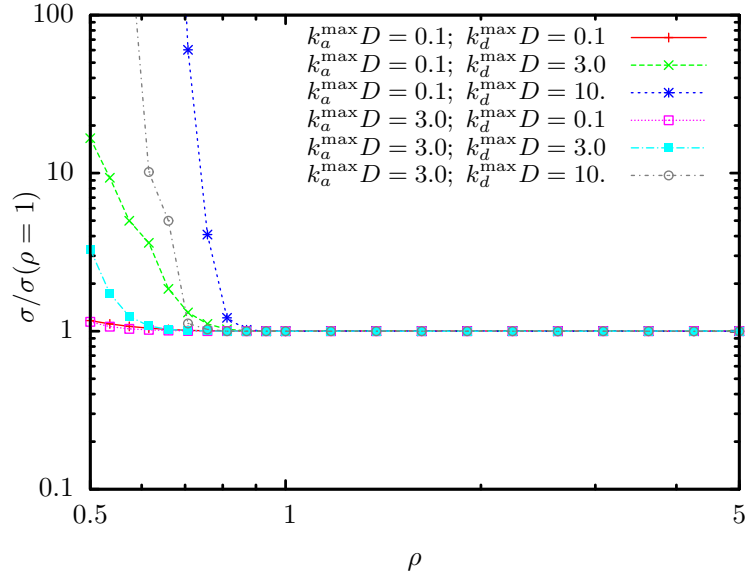
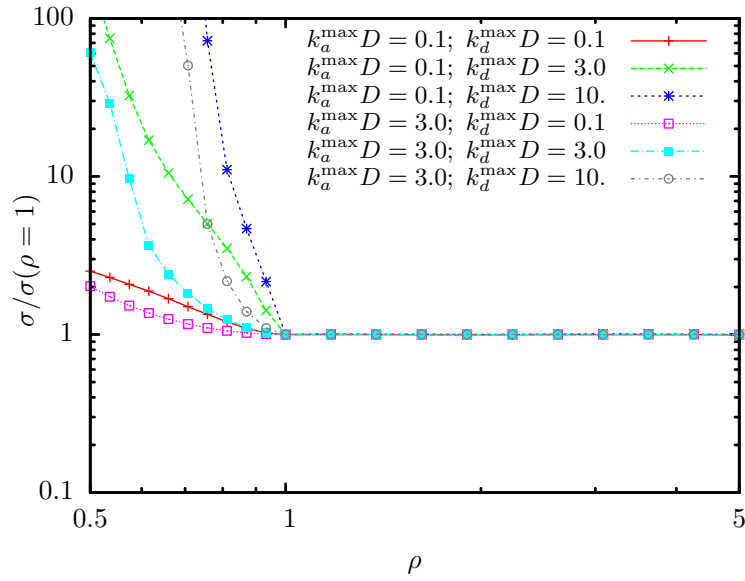
(A) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ (B) $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$

FIGURE 4.9 – Écart-type adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$ pour le calcul de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.8.

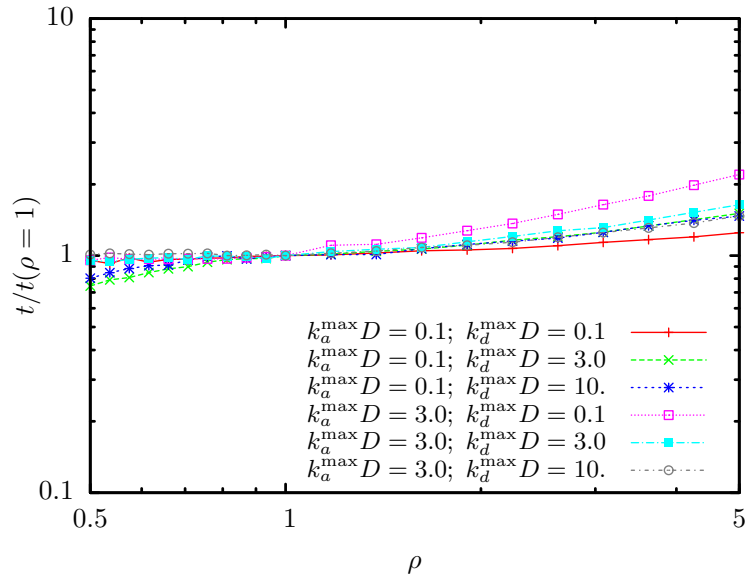
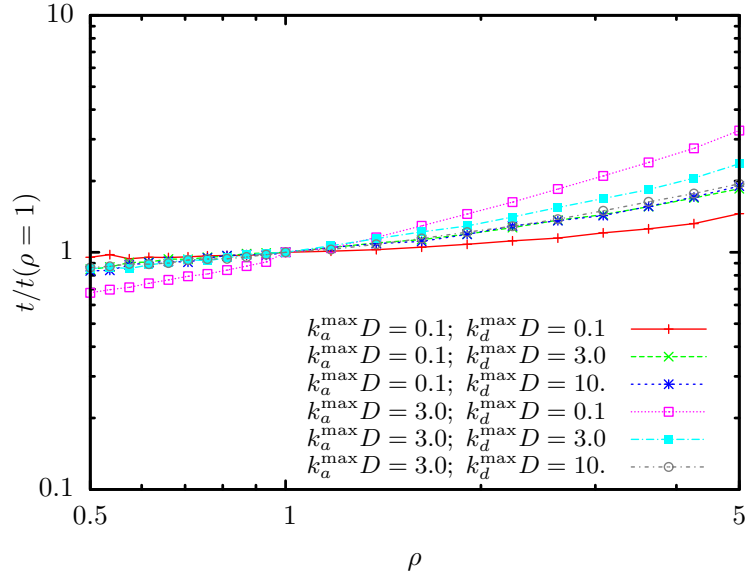


FIGURE 4.10 – Temps de calcul adimensionnalisés en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$ pour le calcul de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.8.

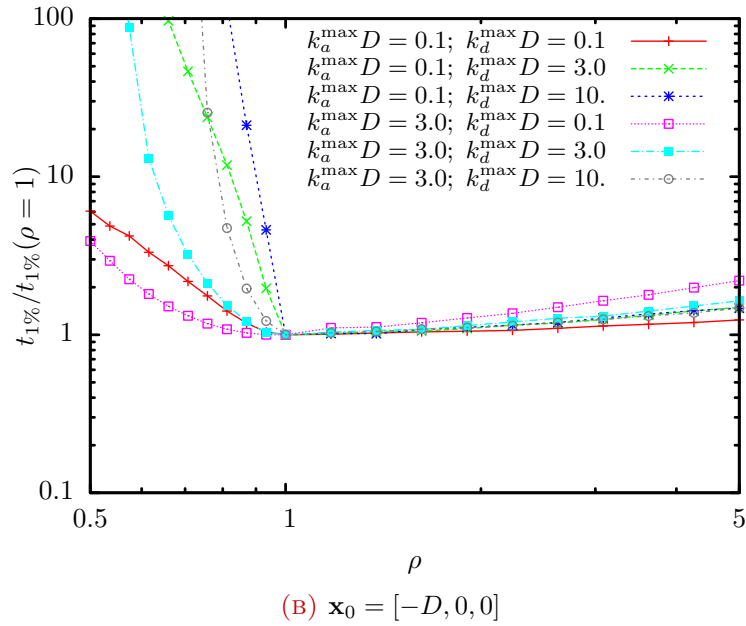
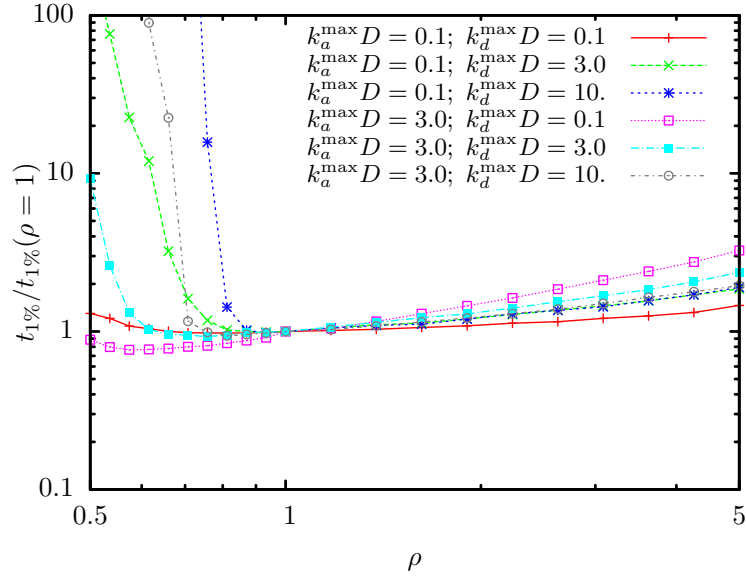


FIGURE 4.11 – Temps de calcul pour une erreur relative de 1% adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$ pour le calcul de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.8.

un échantillonnage plus aisé des libres parcours d'extinction. L'ajout de collisions nulles a seulement une incidence sur le temps de calcul : plus il y aura de collisions nulles (sans effet sur la convergence du calcul) plus le temps de calcul sera long (voir Fig. 4.10 et Fig. 4.11).

Au contraire, plus la valeur de ρ est petite devant 1, plus l'écart-type associé à l'estimation du bilan radiatif est important et croît de façon rapide, voir Fig. 4.8. Ce comportement était en effet attendu. L'introduction de nouvelles probabilités permettant de prendre en compte des occurrences négatives de $k_{n,\eta}$ engendre dans l'expression des poids de Monte-Carlo l'apparition d'un produit correctif. La valeur de ce dernier croît et est susceptible de changer de signe à chaque fois qu'une collision a lieu dans une région où les coefficients de collision nulle sont négatifs (cf. Sec. 4.2.4). Si un grand nombre d'événements de diffusion ou de collisions nulles se produisent le long du chemin optique dans une région où $k_n < 0$, les poids de Monte-Carlo peuvent alors avoir des valeurs absolues très importantes et d'une très grande variance, expliquant ainsi l'accroissement conséquent de l'écart-type associé à l'estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$. Cet effet est naturellement plus prononcé lorsque le point sonde \mathbf{x}_0 appartient à la zone où $k_{n,\eta} < 0$ (voir Fig. 4.9b) que lorsque les chemins optiques partent d'une zone où $k_{n,\eta} > 0$ (voir Fig. 4.9a).

Toutefois, cette augmentation brutale de l'écart-type doit être relativisée : la proposition de la Sec. 4.2.4 permettant d'autoriser des occurrences de $k_{n,\eta} > 0$ est faite pour éviter un biais des résultats de simulations dans le cas où le champ de \hat{k}_η choisi ne majorerait pas parfaitement le champ du coefficient d'absorption réel (elle n'entraîne aucune modification si $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) > k_\eta(\mathbf{x})$). Ainsi, on remarque que si le choix du champ de \hat{k}_η est suffisamment bien pensé ($\rho > 0.9$), l'augmentation d'écart-type due aux coefficients négatifs de collisions nulles reste mesurée (elle est multipliée par 4 dans le cas le plus défavorable).

Enfin, ces trois jeux de graphiques nous permettent de constater que les temps de calcul décroissent avec la valeur de ρ pour un nombre donné N_{mc} de réalisations indépendantes, (voir Fig. 4.10). Cela vient simplement du fait que plus faible est la valeur de ρ , moins il y a d'événements de diffusion et de collisions nulles. En effet, plus ρ est faible, plus la valeur de \hat{k} l'est aussi, les libres parcours échantillonnés selon $\hat{p}_L(l)$ sont alors beaucoup plus longs, favorisant une absorption rapide aux parois. Toutefois, excepté pour le cas particulier d'un milieu très mince, cette décroissance des temps de calcul ne compense pas l'augmentation de l'erreur relative due aux coefficients négatifs de collision nulle (voir Fig. 4.11). Pour une erreur relative désirée, le temps de calcul est donc à la fois conditionné par l'effet de ρ sur la variance (voir Fig. 4.11 pour $\rho < 1$) et sur la quantité de collisions nulles qui augmente mécaniquement, mais dans une moindre mesure, ce temps de calcul (voir Fig. 4.11 pour $\rho > 1$). À la vue de l'évolution des temps de calcul nécessaires à l'obtention d'une erreur relative d'1%, il semble préférable, en cas de doute, de définir un champ de \hat{k} majorant largement celui du coefficient d'extinction que de risquer une explosion de variance causée par un trop grand nombre de collisions nulles caractérisées par des coefficients négatifs.

4.3.2.5 Influence de l'émissivité et du paramètre d'asymétrie de la fonction de phase

Plusieurs simulations ont également été réalisées pour des paramètres d'asymétrie de la fonction de phase différents de 0 et des émissivités de paroi inférieures à 1.

Le paramètre d'asymétrie n'a que très peu d'effet sur le comportement numérique de l'algorithme à collisions nulles. Inévitablement, l'estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ est sensible à ces changements (puisque le modèle physique est modifié), mais les effets sur les erreurs relatives et les temps de calcul semblent négligeables.

La réflexion multiple aux parois a, quant à elle, des conséquences sur le comportement de l'algorithme. Elle agit de la même manière que la diffusion : elle a une tendance à accroître la longueur des chemins parcourus par les photons avant d'être absorbés. Ainsi, un plus grand nombre de collisions ont lieu, augmentant alors les temps de calcul. Dans les zones où les coefficients de collision nulle sont négatifs, la réflexion multiple a tendance, au même titre que la diffusion (*cf.* Fig. 4.11) mais dans une moindre mesure, à augmenter davantage l'écart-type estimé.

4.3.3 Traitement déterministe des événements d'émission - approche par "Energy-partitioning"

Jusqu'à présent, à chaque fois qu'un point de collision était identifié, un test statistique, de type roulette russe, avait lieu pour savoir s'il s'agissait d'une émission (par le milieu ou par la paroi), d'une réflexion, d'une diffusion ou d'une collision nulle. S'il s'agissait d'une émission, la réalisation serait stoppée et un poids w_i serait calculé. Il pourrait cependant être intéressant de traiter de façon déterministe ces événements d'émission. Ainsi, après une émission/absorption les photons continueraient leur chemin, mais une information locale relative à l'émission serait prise compte. Les poids de Monte-Carlo w_i seraient alors définis comme une somme de contributions d'émission rencontrées le long d'un chemin optique. Une telle approche, présentée à la Sec. 3.4.2, est connue sous le nom d'*energy-partitioning* ou de *pathlength-method*. L'application de ce traitement déterministe à l'estimation du bilan radiatif monochromatique $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ et ses conséquences sur le comportement numérique des algorithmes à collisions sont discutés dans cette section.

4.3.3.1 Présentation de l'algorithme de type "energy partitioning"

Traiter de façon déterministe les émissions équivaut à reformuler l'Eq. 4.36 en :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \\ + \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.38)$$

où les émissivités $\varepsilon(\mathbf{x}_{w,1})$ et l'albédo d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1)$ sont désormais traités de façon déterministe. Les probabilités $\tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_j)$ et $\tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_j)$ ont volontairement été conservées, car d'un point de vue algorithmique il est très difficile de suivre deux chemins optiques simultanément (problèmes de branchage : à chaque collision deux nouveaux chemins optiques seraient créés, chacun menant à deux autres chemins, *etc.*). Il demeure plus simple de réaliser un test de Bernoulli pour déterminer si la collision mène à une diffusion du photon (selon la fonction de phase $\phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1})$) ou à une collision nulle (diffusion vers l'avant). Cependant, les expressions de ces deux probabilités doivent être modifiées pour que leur somme soit bien normée. Dans l'optique d'autoriser des occurrences de coefficients de collision nulle négatifs, nous proposons ici les expressions

$$\tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_j) = \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_j) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|} \quad (4.39)$$

et

$$\tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_j) = \frac{|k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|}{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_j) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|} \quad (4.40)$$

Le bilan radiatif $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ correspond alors à l'espérance de la variable aléatoire W définie comme :

$$W = \sum_{j=1}^{\infty} \left[\mathcal{H}(\mathbf{X}_j \notin \mathcal{V}) \varepsilon(\mathbf{X}_{w,j}) L_\eta^{eq}(\mathbf{X}_{w,j}) + \mathcal{H}(\mathbf{X}_j \in \mathcal{V}) \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{X}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{X}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{X}_j) \right] \times \prod_{q=1}^{j-1} \left(A_{r,q} (1 - \varepsilon(\mathbf{X}_{w,q})) + A_{d,q} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{X}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{X}_q) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{X}_q)} + A_{n,q} \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{X}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{X}_q) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{X}_q)} \right) \quad (4.41)$$

où la variable aléatoire $A_{r,j}$ vaut 1 si une réflexion a lieu en $\mathbf{x}_{w,j}$, 0 sinon ; où $A_{d,j}$ vaut 1 si une diffusion a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon et où $A_{n,j}$ vaut 1 si une collision nulle a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.

Toutefois, implémenter un algorithme de Monte-Carlo qui consiste à échantillonner W pose un sérieux problème dès lors que les parois ne sont pas noires : les chemins que parcourent les photons sont infinis. En effet, à chaque collision, une contribution d'émission est calculée, puis le chemin optique est poursuivi. En aucun cas, un événement n'est capable de stopper la progression de ce chemin. En des termes plus algorithmiques, on voit apparaître une boucle, sans condition d'arrêt.

Plutôt que de stopper arbitrairement ces chemins, on propose alors de définir un test dans l'algorithme qui, une fois validé, fera permuter cet algorithme (dans lequel les émissions sont traitées de façon déterministe) vers son homologue dans lequel le type de collision est déterminé par un test de Bernoulli (*cf.* [Sec. 4.3.2](#)). Ainsi, ces chemins infinis pourront être stoppés sans aucun biais (ce qui n'aurait pas été le cas si l'on avait tronqué arbitrairement ces chemins). Le critère faisant passer d'une variante algorithmique à l'autre est totalement libre. Nous proposons ici de considérer la grandeur

$$\xi_j = \prod_{q=1}^{j-1} \left(A_{r,q}(1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,q})) + A_{d,q} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_q)} + A_{n,q} \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_q)} \right) \quad (4.42)$$

présente dans l'expression de W . Cette grandeur, que nous qualifierons de *critère d'extinction*, caractérise la fraction de photons transmise après j collisions. Au début de la réalisation, quand aucune collision n'a encore eu lieu, elle est égale à 1, puis elle ne cesse de décroître au fur et à mesure que des collisions sont rencontrées, rendant ainsi les contributions à W de plus en plus faibles. Pour définir le test à partir duquel les émissions seront traitées de façon statistique, on définit également un seuil ζ compris entre 0 et 1. Tant que $\xi_j > \zeta$ les émissions sont traitées de façon déterministe, puis lorsque ξ_j passe en dessous du seuil ζ on passe à un traitement par tests de Bernoulli pour déterminer le type de collision, permettant ainsi de mettre un terme à la réalisation. Plus la valeur de ζ sera faible, plus la branche où les émissions sont prises en compte de façon déterministe sera privilégiée. Au contraire, en fixant $\zeta = 1$, l'algorithme correspond strictement à celui présenté à la [Sec. 4.3.2](#) : toutes les collisions seront traitées statistiquement par un test de Bernoulli. L'algorithme correspondant à cette approche est présenté en intégralité par la [Fig. 4.12](#).

4.3.3.2 Influence de ζ sur le comportement numérique de l'algorithme à collisions nulles

Aussi, il est intéressant d'étudier l'influence que joue ce seuil ζ sur le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo. Des bilans radiatifs monochromatiques $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ aux points $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ ont alors été estimés par l'algorithme présenté à la [Fig. 4.12](#), pour différentes valeurs de ζ , de ρ et pour différentes épaisseurs optiques maximales $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$. La valeur du champ d'extinction arbitraire \hat{k}_η est définie comme égale à k_η^{\max} ($\rho = 1$, les coefficients de collision nulle sont positifs en tout point).

Les [Tab. 4.3](#) et [4.4](#) rassemblent les résultats de simulations obtenus aux deux

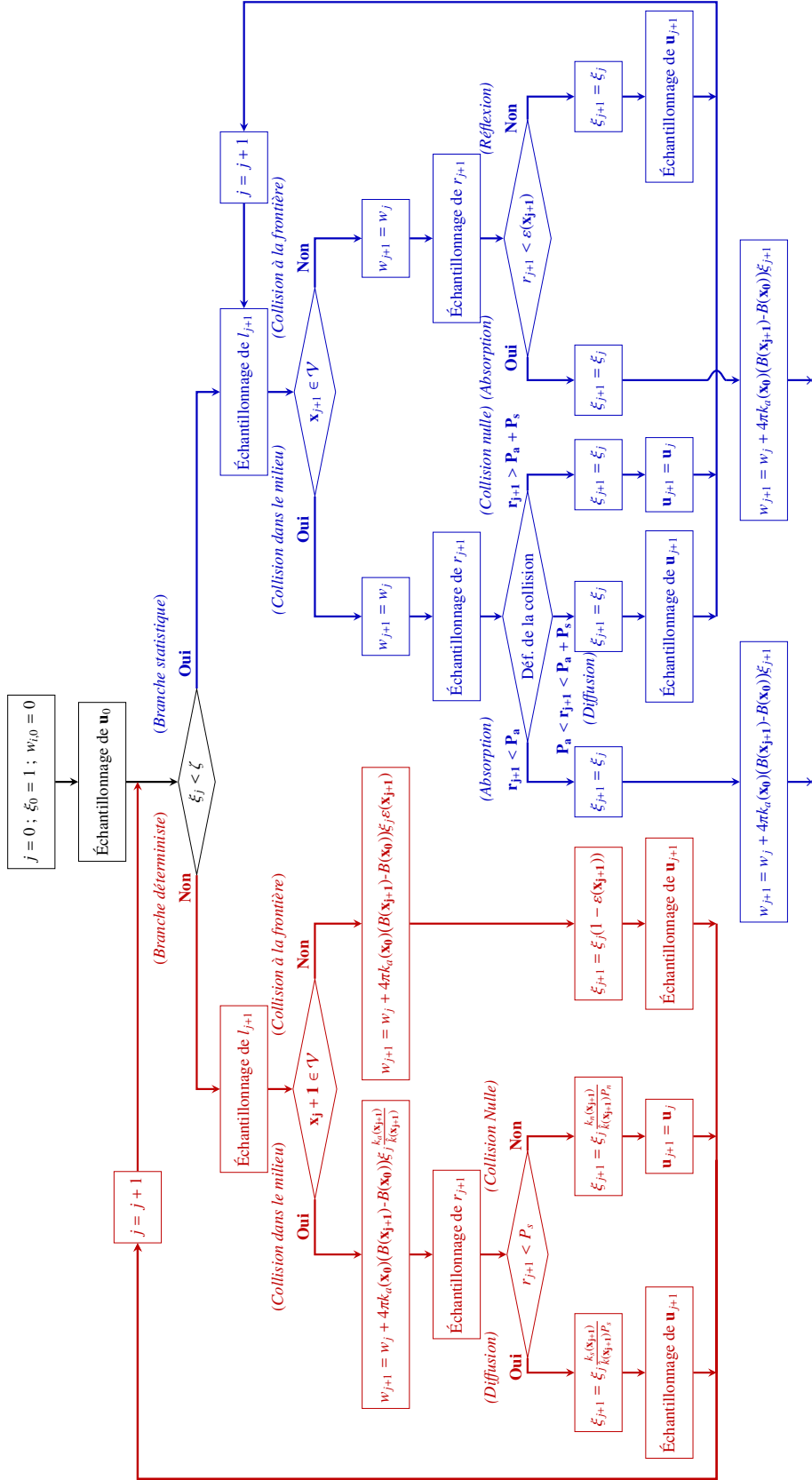


FIGURE 4.12 – Description de l'algorithme proposé. Tant que le critère d'extinction ξ_j est supérieur à ζ les émissions sont traitées de façon déterministe. Une fois ce seuil passé, l'algorithme permute vers l'algorithme présenté à la Fig. 4.8 dans lequel les émissions sont traitées de façon statistique.

points sondes $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ pour des parois noires et pour un seuil ζ fixé à 0.1 (le basculement de la branche déterministe à celle stochastique a lieu lorsque l'extinction le long du chemin optique dépasse 90%). Ces résultats peuvent être comparés à ceux des Tab. 4.1 et 4.2 obtenus avec l'algorithme présenté à la Fig. 4.8 dans lequel les collisions sont traitées uniquement par roulette russe (cet algorithme est strictement équivalent à celui de la Fig. 4.12 dans lequel le seuil ζ serait fixé à 1).

Epaiss. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations, $\zeta = 0.1$)				Comp.
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ	t	$t_{1\%}$	$\frac{t_{1\%}(\zeta=0.1)}{t_{1\%}(\zeta=1)}$
		$4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)$	$4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)$			
0.1	0.1	-0.483586	0.000044	2.31	0.00019	0.253
0.1	1	-0.481950	0.000024	7.77	0.00019	0.072
0.1	3	-0.477917	0.000023	23.72	0.00054	0.055
0.1	10	-0.463036	0.000035	122.94	0.00707	0.081
1	0.1	-0.366263	0.000142	3.38	0.00510	0.552
1	1	-0.356208	0.000123	10.10	0.01200	0.475
1	3	-0.335460	0.000117	27.58	0.03373	0.422
1	10	-0.277008	0.000127	127.77	0.26892	0.541
3	0.1	-0.219155	0.000153	5.51	0.02701	0.785
3	1	-0.209308	0.000144	12.76	0.06017	0.903
3	3	-0.190219	0.000132	29.96	0.14535	0.927
3	10	-0.143645	0.000112	105.20	0.64103	0.993
10	0.1	-0.071424	0.000081	8.66	0.11055	1.185
10	1	-0.068768	0.000077	13.11	0.16317	1.310
10	3	-0.063507	0.000070	22.45	0.27110	1.393
10	10	-0.050786	0.000054	52.92	0.59544	1.366

TABLE 4.3 – Résultats et temps de calcul obtenus lors de l'estimation de $S_{r,\eta}$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ par l'algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.12. Le seuil de permutation algorithmique est fixé à $\zeta = 0.1$. La dernière colonne indique le rapport entre le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 0.1$ et le temps nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 1$.

On constate que les résultats obtenus avec ce nouvel algorithme où $\zeta = 0.1$ concordent parfaitement, aux intervalles de confiance près, avec ceux obtenus avec l'algorithme où les collisions sont traitées uniquement par roulette russe ($\zeta = 1$). La proposition faite dans cette section est ainsi validée. La dernière colonne de ces deux tables indique le rapport entre le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 0.1$ et le temps nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 1$. Si ce rapport est inférieur à 1, le traitement déterministe des émissions est plus efficient qu'un traitement par roulette russe. Au contraire s'il est supérieur à 1, l'algorithme introduit à la Fig. 4.8 est le plus performant. On remarque alors que pour des épaisseurs optiques d'absorption minces, le traitement déterministe des émissions accélère sensiblement les temps de calcul (jusqu'à 12 fois plus rapides). Pour des épaisseurs optiques d'absorption importantes, il a tendance à augmenter ces mêmes temps de calcul (d'un facteur 3 dans le cas le plus défavorable). Il est possible d'interpréter cette différence de comportement algorithmique par le fait qu'en traitant de façon déterministe les collisions, de l'information relative

Epaiss. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations, $\zeta = 0.1$)				Comp.
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$\frac{S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	t	$t_{1\%}$	$\frac{t_{1\%}(\zeta=0.1)}{t_{1\%}(\zeta=1)}$
0.1	0.1	-0.977195	0.000081	2.24	0.00016	0.413
0.1	1	-0.976700	0.000041	6.19	0.00011	0.103
0.1	3	-0.975783	0.000035	15.17	0.00020	0.074
0.1	10	-0.974777	0.000042	46.19	0.00088	0.103
1	0.1	-0.821998	0.000285	3.31	0.00398	1.138
1	1	-0.821967	0.000237	8.34	0.00692	0.897
1	3	-0.823956	0.000215	17.71	0.01202	0.717
1	10	-0.839442	0.000220	46.75	0.03208	0.831
3	0.1	-0.657423	0.000388	4.23	0.01471	1.782
3	1	-0.664806	0.000365	9.43	0.02851	2.101
3	3	-0.679347	0.000345	16.61	0.04289	1.801
3	10	-0.723130	0.000327	34.46	0.07053	1.574
10	0.1	-0.544147	0.000450	3.72	0.02660	1.922
10	1	-0.551601	0.000452	7.88	0.05288	3.089
10	3	-0.568200	0.000438	10.89	0.06467	2.791
10	10	-0.611147	0.000411	19.32	0.08731	2.305

TABLE 4.4 – Résultats et temps de calcul obtenus lors de l'estimation de $S_{r,\eta}$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.12. Le seuil de permutation algorithmique est fixé à $\zeta = 0.1$. La dernière colonne indique le rapport entre le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 0.1$ et le temps nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 1$.

à l'émission du milieu est capitalisée tout le long du chemin optique, jusqu'à ce que la permutation algorithmique ait lieu. Ainsi, l'émission de l'ensemble du milieu d'intérêt est mieux prise en compte que si les émissions étaient traitées par roulette russe. En effet, dans le cas où les épaisseurs optiques d'absorption sont faibles, il était nécessaire, sans traitement déterministe, de parcourir un chemin optique important avant de rencontrer une émission et de réaliser un grand nombre de réalisations pour pouvoir être suffisamment représentatif de l'émission de la totalité du volume d'intérêt. Cela explique, pour ce type de milieu, l'accélération des temps de calcul engendrée par ce nouvel algorithme. Au contraire, lorsque l'épaisseur optique d'absorption est importante, la grande majorité des photons parvenant en \mathbf{x}_0 a été émise dans la zone proche de ce point. Un traitement par roulette russe de ces événements d'émission est alors pertinent ; le traitement déterministe n'aura pour seule conséquence une augmentation de la longueur des chemins parcourus avant que la réalisation soit stoppée, entraînant ainsi une augmentation des temps de calcul.

Dans les Tab. 4.3 et 4.4, une seule valeur du seuil ζ a été testée : $\zeta = 0.1$. Mais, diminuer la valeur de ce seuil à 10^{-2} ou même 10^{-5} n'entraîne qu'un changement minime des temps de calcul. En effet, une fois que les chemins optiques ont atteint une paroi noire, le critère d'extinction ξ passe à 0 (quelle que soit la valeur de ζ) et l'algorithme permute vers la branche où les événements d'émission sont traités par roulette russe, mettant ainsi fin au chemin optique. La Fig. 4.13a illustre la dépendance du temps de calcul pour une erreur relative donnée au seuil ζ , pour une émissivité de paroi de 1 et pour le point sonde $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$. Des simulations

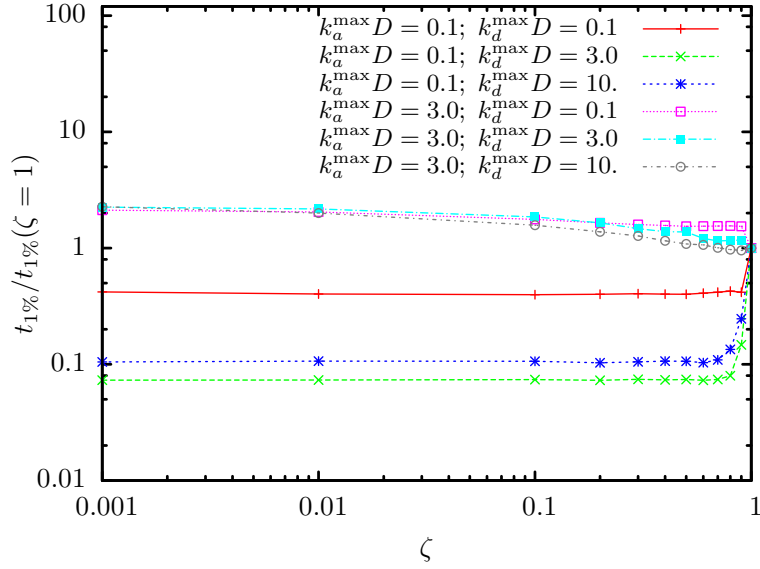
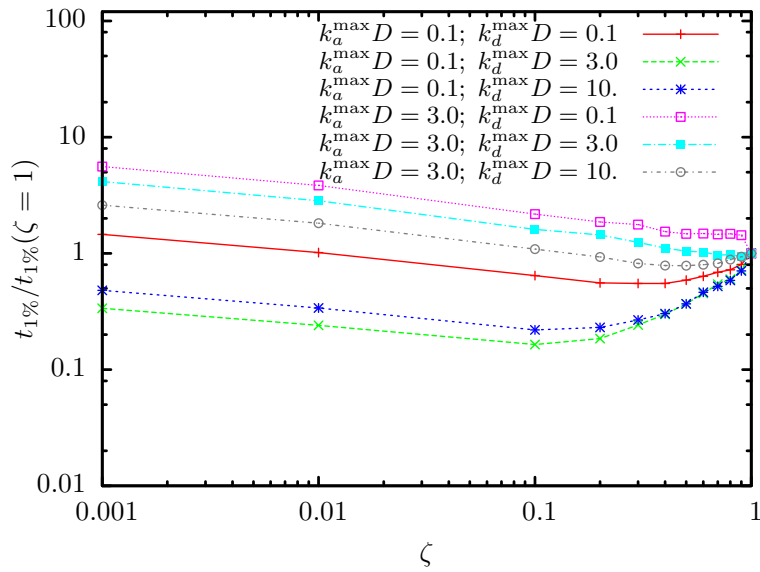
(A) $\varepsilon = 1$ (B) $\varepsilon = 0$

FIGURE 4.13 – Temps de calcul nécessaire à l’obtention d’une erreur relative de 1% en fonction du seuil ζ . Les temps affichés sont relatifs à l’estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l’algorithme de la Fig. 4.12 pour deux émissivités de parois : $\varepsilon = 1$ et $\varepsilon = 0$ et pour différentes épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion.

ont également été réalisées pour des parois parfaitement réfléchissantes ($\varepsilon = 0$). Les conclusions sont identiques aux précédentes, mais la sensibilité au choix du seuil ζ est plus importante (voir Fig. 4.13b). En effet, puisque les parois, désormais réfléchissantes, ne permettent plus de stopper les réalisations, les chemins parcourus avant que l'algorithme ne permute sont considérablement plus longs. Cela se traduit alors par une augmentation des temps de calcul lorsque ζ décroît.

Les résultats obtenus mettent donc en valeur le fait que traiter les émissions de façon déterministe, conduit à :

- une diminution de la variance de l'estimation (au moins dans le cas de faibles épaisseurs optiques d'absorption) : de l'information relative à l'émission du milieu est accumulée tout le long du chemin optique, jusqu'à ce que la permutation algorithmique ait lieu.
- une augmentation des temps de calcul pour une réalisation donnée : plus la valeur de ζ sera faible et plus la permutation algorithmique aura lieu tard. Les chemins considérés lors d'une seule réalisation indépendante seront alors plus longs, puisqu'aucune absorption ne permet de stopper la récursivité. Seul le basculement vers un traitement stochastique des collisions ou une paroi noire le permettront.

Les performances de la proposition algorithmique faite ici, quantifiées par les temps de calcul à 1%, sont donc dépendantes de ces deux phénomènes. Comme en atteste la Fig. 4.13, il est alors possible de déterminer une valeur optimale du seuil ζ , qui permet d'avoir le meilleur compromis entre diminution de la variance et augmentation du temps moyen par réalisation. Selon le type du milieu, sa valeur se situe entre 0.1 et 1. L'ajustement de la valeur de ζ , en fonction du cas d'étude d'intérêt, constitue alors un important levier d'optimisation (permettant, dans des cas particuliers, d'accélérer les calculs d'un ou plusieurs ordres de grandeur).

4.3.3.3 Influence des collisions nulles sur l'algorithme de type "energy partitioning"

Le nouvel algorithme introduit dans cette section (voir Fig. 4.12) permet également de traiter des occurrences négatives de coefficients de collision nulle. La Fig. 4.14 illustre la dépendance du temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% au paramètre $\rho = \hat{k}_\eta / k_\eta^{\max}$ pour $\zeta = 1$ (Fig. 4.14a) et $\zeta = 0.1$ (Fig. 4.14b). Nous nous concentrons ici, uniquement sur le point d'intérêt, $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$, identifié comme le point le plus pathologique (puisque situé dans la zone où les coefficients de collision nulle sont les plus faibles). Les parois sont également considérées comme noires et la fonction de phase comme isotrope. Les conclusions semblent identiques à celles formulées à la Sec. 4.3.2.4. Toutefois,

- pour $\rho < 1$ (*i.e.* quand le coefficient \hat{k}_η ne majore que localement le coefficient d'extinction réel), des difficultés de convergence plus importantes sont rencontrées pour des épaisseurs optiques d'absorption faibles et de diffusion importantes.
- pour $\rho > 1$ (*i.e.* le champ de \hat{k}_η est majorant en tout point), l'augmentation du nombre de collisions nulles (ρ croissant) entraîne une diminution du temps

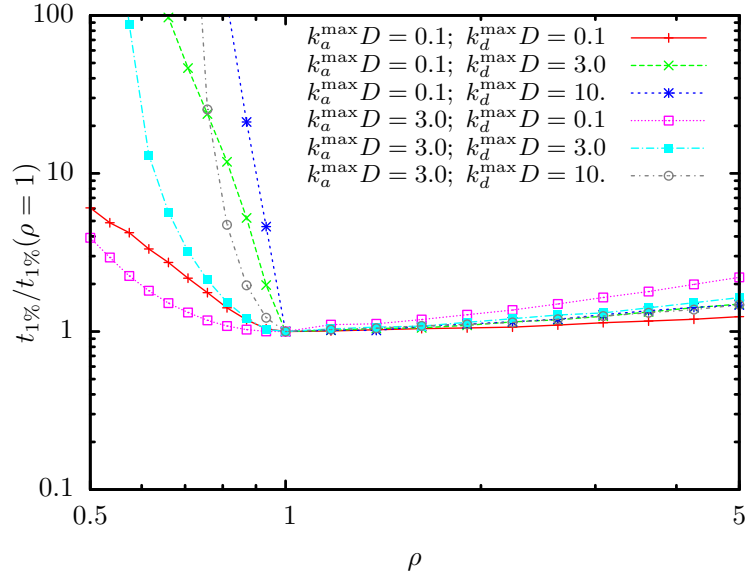
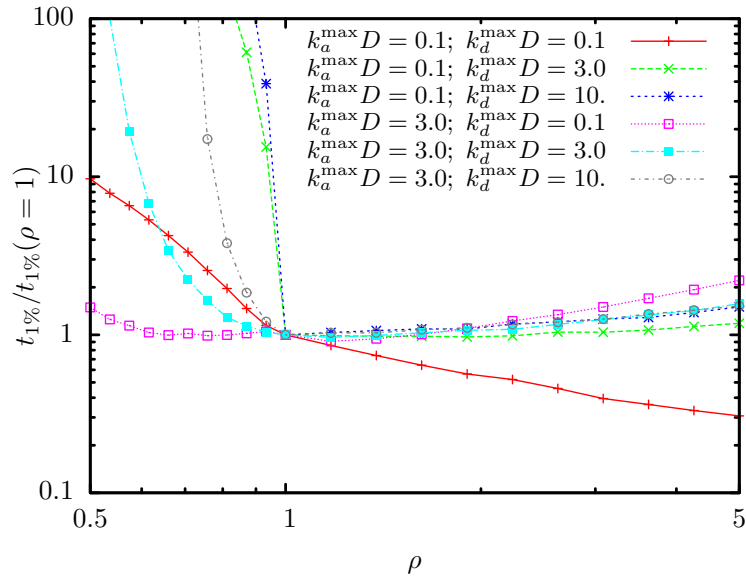
(A) $\zeta = 1$ (B) $\zeta = 0.1$

FIGURE 4.14 – Temps de calcul nécessaire à l’obtention d’une erreur relative de 1% en fonction de la grandeur adimensionnelle $\rho = \hat{k}_\eta/k_\eta^{\max}$. Les temps affichés sont relatifs à l’estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l’algorithme de la Fig. 4.12 pour deux seuils de basculement algorithmique : $\zeta = 1$ et $\zeta = 0.1$ et pour différentes épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion.

de calcul à 1%. En effet, plus le \hat{k}_η est important plus les libres parcours échantillonnés seront petits. Ainsi, le nombre répété de calculs des contributions d'émissions mène à une intégration quasi-déterministe le long du chemin optique qui réduit sensiblement la variance (en particulier lorsque les épaisseurs optiques sont minces).

4.3.4 Enseignements sur les choix du \hat{k}_η et du type d'algorithme

Cette étude paramétrique souligne l'importance qu'a le choix du champ de \hat{k}_η . On rejoint les conclusions émises à la [Sec. 4.2.4](#) : le champ de \hat{k}_η doit être choisi de sorte à être le plus proche du champ réel de coefficient d'extinction (pour éviter un trop grand nombre de collisions nulles) tout en permettant un échantillonnage aisé des libres parcours. Dans cette étude nous avons fait le choix de définir $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ comme une fonction uniforme, mais il est imaginable de le définir comme une fonction uniforme ou même continue par morceaux. Il serait ainsi possible d'approcher plus précisément le champ d'extinction tout en garantissant un échantillonnage des libres parcours analytiquement possible, au prix d'un coût de calcul éventuellement plus important.

De plus, cette analyse a permis de mesurer l'augmentation de variance associée à un champ de \hat{k}_η non-majorant. Il semble donc évident que des cas de ce type doivent être évités autant que possible. Toutefois, le fait d'avoir ouvert la possibilité aux coefficients négatifs de collision nulle n'est pas pour autant injustifié. Assurer la majoration du champ d'extinction peut constituer une tâche très complexe comme nous allons le voir dans le [Chap. 5](#). Avec la proposition faite dans ce chapitre, nous pouvons désormais implémenter des algorithmes dont l'estimation ne sera aucunement biaisée si une occurrence du type $k_{n,\eta} < 0$ devait avoir lieu. Les quelques simulations, présentées dans cette étude paramétrique, indiquent que si le champ de \hat{k}_η majore en la plupart des points le coefficient d'extinction, mais pas strictement ($\rho \gtrsim 0.9$), l'augmentation du temps de calcul pour une précision donnée demeure mesurée.

Enfin, considérer les événements d'émission de façon déterministe (energy-partitioning) paraît être l'approche la plus efficace pour les milieux optiquement minces (qui représentent, pour des chambres de combustion de petite taille, une grande majorité des cas rencontrés). Dans la suite de ce manuscrit, cette technique sera systématiquement employée. La variété des épaisseurs optiques sera alors prise en compte en jouant sur le paramètre ζ pour optimiser le comportement de l'algorithme en fonction du cas d'étude.

4.4 Validation d'un solveur radiatif par les algorithmes à collisions nulles

Dans de nombreux domaines d'application (combustion, atmosphérique, etc.), les modèles radiatifs sont généralement couplés à d'autres modèles de transfert

thermique, de mécanique des fluides ou encore de cinétique chimique. Dans ces contextes, où la complexité due aux couplages est importante, il est souvent nécessaire de faire un compromis entre la précision attendue et les temps de calcul. Aussi, il est important d'évaluer la validité des méthodes numériques et des modèles résultant de ces compromis. Dans le cadre particulier du transfert radiatif, les méthodes de Monte-Carlo occupent une place de solution de référence, dans la mesure où les résultats sont fournis avec un intervalle de confiance. Très adaptées à la simulation du rayonnement en géométries complexes [Zhang *et al.*, 2009, Zhang, 2011, De La Torre *et al.*, 2014, Dauchet, 2012], elles sont aujourd'hui fréquemment utilisées pour valider des outils de simulation ou des modèles radiatifs approchés.

Toutefois, bien que considérées comme des méthodes de référence, leur prise en compte des hétérogénéités des propriétés des milieux peut conduire à certaines approximations (*ex* : discrétisation du milieu, voir [Sec. 4.1.2](#)). Les algorithmes à collisions nulles peuvent alors constituer une alternative intéressante aux méthodes usuelles de Monte-Carlo. En effet, ils tirent directement profit des avantages de ces dernières (incertitude numérique maîtrisée en permanence, gestion des géométries complexes, *etc.*), sans nécessiter une discrétisation du milieu ou d'autres techniques approchées. Ainsi, les estimations des observables d'intérêt sont non-biaisées et peuvent être réellement considérées comme résultats de référence.

4.4.1 Description du cas d'étude et de l'exercice de validation

Dans l'article [Eymet *et al.*, 2013] (donné en [Annexe E](#)), les auteurs proposent d'utiliser l'algorithme à collisions nulles, introduit à la [Fig. 4.12](#), pour valider le code PRISSMA [Poitou *et al.*, 2012], conçu pour des applications de combustion. Ce module de transfert radiatif, basé sur des méthodes aux ordonnées discrètes [Joseph *et al.*, 2005], est intégré au code de calcul AVBP, développé pour la simulation d'écoulements réactifs instationnaires sur des maillages hybrides [Cerfacs, 2014].

Dans le cadre de cet exercice de validation, un grand nombre de bilans radiatifs intégrés spectralement, sur tout le domaine infrarouge, sont calculés par les deux algorithmes (algorithme à collisions nulles et PRISSMA) en divers points d'une chambre de combustion dont la configuration retenue correspond à celle proposée par Knikker *et al.* [Knikker *et al.*, 2000, Nottin *et al.*, 2000, Knikker *et al.*, 2002]. Les dimensions de la chambre, illustrée à la [Fig. 4.15](#), sont de $300 \times 50 \times 80 \text{ mm}$ (respectivement le long des axes x , y et z). Un accroche-flamme triangulaire est positionné sur les côtés latéraux à une hauteur de 25 mm . Un mélange d'air et de propane est injecté par le côté gauche et une flamme triangulaire se développe dans le conduit rectangulaire le long de l'axe x . Les températures de parois sont fixées à 300 K , excepté pour la paroi de droite où la température est fixée à 1900 K . La réflectivité des parois en céramique est fixée à $\varepsilon = 0.91$, celle des parois en quartz à $\varepsilon = 0.4$. L'émissivité de l'accroche-flamme est fixée à $\varepsilon = 0.4$, une valeur caractéristique d'un acier oxydé à 1000 K . L'entrée, la sortie et l'atmosphère sont

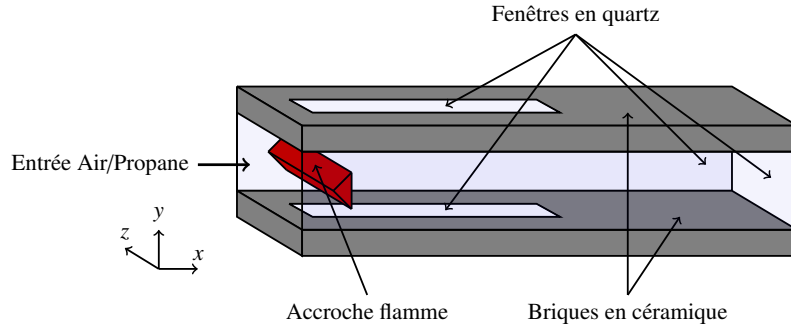


FIGURE 4.15 – Configuration de chambre de combustion retenue et proposée par Knikker et al. dans [Knikker *et al.*, 2000, Nottin *et al.*, 2000, Knikker *et al.*, 2002].

supposées se comporter comme des parois noires.

L'objectif de l'étude décrite dans [Eymet *et al.*, 2013] est alors de valider le code de transfert radiatif PRISSMA, dans lequel :

- la méthode de résolution de l'équation du transfert radiatif est une approche aux ordonnées discrètes (DOM),
- l'intégration spatiale s'appuie sur un maillage spécifique, plus grossier que le maillage LES^4 utilisé par le code AVBP. La stratégie de couplage avec AVBP est décrite plus en détail dans [Poitou *et al.*, 2012],
- l'intégration angulaire s'appuie sur le schéma de quadrature S_4 (seules 24 directions sont considérées),
- l'intégration spectrale est effectuée en utilisant un modèle "full-spectrum" (FSK) décrit par seulement 15 points de quadrature,
- les discrétisations spatiales, angulaires et l'intégration spatiale utilisées sont volontairement définies aux limites basses de leur domaine de validité afin de répondre aux exigences du code AVBP en termes de temps de calcul. Aussi, dans la pratique, le module PRISSMA doit être validé par un code de calcul radiatif à chaque fois qu'une nouvelle configuration de chambre de combustion est prise en considération.

par un algorithme à collisions nulles, dont :

- la structure algorithmique est strictement identique à celle présentée à la Fig. 4.12. Seule une étape préliminaire d'échantillonnage spectral est ajoutée, permettant d'intégrer le bilan radiatif sur tout le domaine infrarouge. Le champ du coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ est défini de sorte à rendre le champ d'extinction résultant $\hat{k}_\eta = k_{a,\eta} + k_{n,\eta}$ uniforme et majorant en tout point le champ du coefficient d'extinction réel ($k_{n,\eta} > 0$),
- le modèle d'intégration spectrale retenu repose sur une discrétisation par bande étroite et sur un modèle en k -distributions⁵. Ce choix représente la

4. LES : Large Eddy Simulation (simulation des grandes échelles).

5. Les données spectrales ont été produites en utilisant l'approche SNB-ck (statistical narrow-band correlated k) [Soufiani et Taine, 1997, Liu *et al.*, 2000, Liu *et al.*, 2001, Joseph *et al.*, 2009]

seule approximation faite pour cet algorithme de Monte-Carlo à collisions nulles. Idéalement, pour conserver son caractère de solution de référence, cet algorithme devrait utiliser une approche de type raie-par-raie (dont seules quelques tentatives sont rapportées dans la littérature [Wang et Modest, 2007b, Fomin, 2006]). Ainsi, l'intégration spectrale devrait s'appuyer sur des spectres haute-résolution produits (pour chaque jeu de concentrations, de température et de pression) à partir de bases de données spectroscopiques hautes-températures (*ex* : Hitemp ou CDSD). Cependant du fait de la difficulté et de la lourdeur engendrées par une telle approche, les *k-distributions* associées à une hypothèse de corrélation font encore fréquemment office de solutions de référence. Une proposition alternative à ces modèles, ne requérant aucune approximation et n'étant source d'aucun biais, sera proposée au [Chap. 5](#),

- les résultats sont obtenus sans aucune approximation relative à l'intégration directionnelle et spatiale (l'algorithme proposé ne nécessite la création d'aucun maillage),
- pour être en accord strict avec PRISSMA, les champs de propriétés (température et concentrations) utilisés en entrée de l'algorithme à collisions nulles sont ceux produits par la simulation *LES* du code AVBP [Poitou, 2009, Poitou *et al.*, 2011]. Ces champs de propriétés discrétisés (4.7 millions de tétraèdres) sont décrits par la [Fig. 4.16](#). Les schémas d'interpolations utilisés sont également identiques à ceux utilisés par PRISSMA.

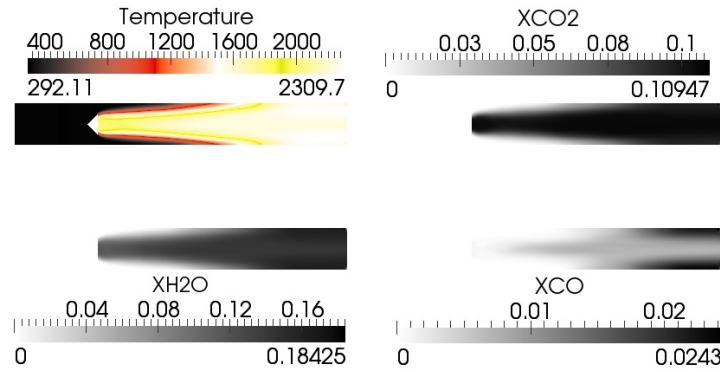


FIGURE 4.16 – Champs de température et de fractions molaires (CO_2 , H_2O et CO) obtenus par le code de simulation aux grandes échelles AVBP pour la configuration de chambre de combustion considérée. Ces champs de propriétés sont utilisés en entrée de l'algorithme à collisions nulles. - Résultats obtenus par D. Poitou.

en séparant les différentes espèces (CO_2 et H_2O) grâce à une hypothèse de décorrélation spectrale. 367 bandes étroites de 25cm^{-1} de largeur, sont utilisées pour calculer les bilans radiatifs et les jeux de *k-distributions* sont construits en accord avec une quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 7. De plus amples détails concernant l'approche utilisée sont donnés dans l'article [Eymet *et al.*, 2013] fourni en [Annexe E](#)

4.4.2 Résultats obtenus

Les résultats obtenus, suite à cet exercice de validation, sont illustrés à la Fig. 4.17 où apparaissent les bilans radiatifs calculés par les deux codes en un grand nombre de points, le long de l'axe x ($y=0, z=0, x \in [0;0.3]$ m) et le long de l'axe y ($x=0.08, y \in [-0.025;0.025]$ m, $z=0$). Les résultats obtenus par l'algorithme à collisions nulles

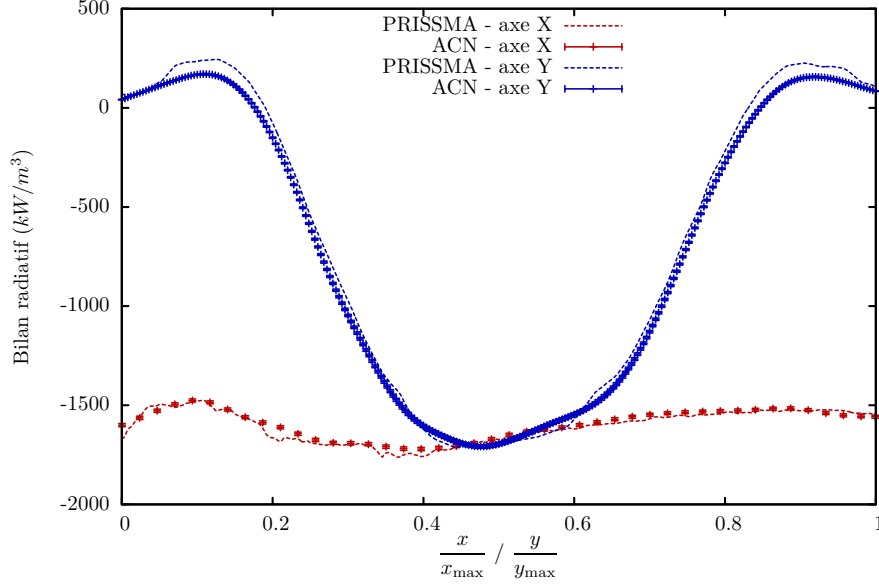


FIGURE 4.17 – Bilans radiatifs calculés par le code PRISSMA et l'algorithme à collisions nulles (fournis avec les intervalles de confiance correspondant) en différents points de la chambre de combustion, le long des axes x ($y=0, z=0, x \in [0;0.3]$ m) et y ($x=0.08, y \in [-0.025;0.025]$ m, $z=0$). Résultats obtenus par D. Poitou (pour PRISSMA) et par V. Eymet (pour l'algorithme à collisions nulles).

(fournis avec une barre d'erreur) semblent en bon accord avec ceux obtenus par PRISSMA. Les résultats ne diffèrent que de quelques pourcents dans les régions où les termes sources sont importants et ces disparités sont légèrement plus marquées sur les côtés de la chambre de combustion. Ces différences s'expliquent en partie par la discrétisation angulaire utilisée par PRISSMA, mais semblent n'avoir que très peu d'incidence sur la simulation globale de la combustion dans cette enceinte. Dans la mesure où l'on considère que le modèle spectral (SNB-ck) utilisé par l'algorithme à collisions nulles est fiable, les résultats produits par cet algorithme peuvent donc être considérés comme référence. Grâce à ces derniers, les spécialistes de la combustion peuvent alors affiner leur modèle radiatif en conséquence, dans la limite des exigences de temps de calcul fixées. On mesure alors l'intérêt majeur qu'offrent les solutions de référence tels que les algorithmes à collisions nulles.

Dans des considérations plus techniques, cet exercice de validation a également permis de mesurer l'impact non négligeable qu'ont les procédures numériques de localisation et d'interpolation. En effet, à chaque nouvelle collision, il est nécessaire de connaître les valeurs locales de pression, de température et de concentrations des différentes espèces, en s'appuyant sur les champs maillés produits par AVBP (fournis avec un schéma d'interpolation). Cette étape, consiste alors à identifier la maille,

parmi les 4.74 millions de tétraèdres, dans laquelle a lieu la collision et de réaliser une interpolation - ici barycentrique - pour chaque propriété afin d'en estimer sa valeur locale. La répétition conséquente de ces étapes de localisation⁶ peut alors représenter l'essentiel du temps de calcul, d'autant plus si la géométrie est comme ici tridimensionnelle. À titre d'ordre de grandeur, sans optimisation de ces procédures de localisation/interpolation, plus de 4 heures étaient nécessaires pour le calcul d'un seul bilan radiatif avec une erreur relative de 1%. Pour pallier ce problème, l'algorithme à collisions nulles a été implémenté dans l'environnement de développement EDStaR [De La Torre *et al.*, 2014, Starwest, 2014a], permettant de réaliser des simulations de Monte-Carlo en géométries complexes. Outre la bibliothèque MCM3D qui permet entre-autres de paralléliser les calculs de Monte-Carlo, cet environnement de développement inclut les bibliothèques de PBRT [Pharr *et Humphreys*, 2010] : un code de synthèse d'image comportant une multitude de procédures d'accélération graphique. Ainsi, grâce à ces procédures accélérant grandement l'étape d'identification de la maille d'intérêt, les temps de calcul ont été réduits de plusieurs heures à quelques dizaines de secondes (40 secondes environ) pour l'estimation d'un bilan radiatif ayant une erreur relative de 1%.

Résumé du chapitre

Lorsque les propriétés radiatives d'un milieu participant sont non-uniformes (telles que l'épaisseur optique d'extinction ne peut pas être évaluée analytiquement le long d'une ligne de visée), il est généralement nécessaire de recourir à certaines approximations (discrétisation des propriétés du milieu ou méthodes numériques de quadrature/inversion) pour résoudre l'équation du transfert radiatif en milieu participant. Dans un souhait de conserver le caractère de référence des méthodes de Monte-Carlo, nous avons, dans ce chapitre, adapté à des problématiques radiatives une technique employée depuis plusieurs décennies dans d'autres domaines de la physique du transport : les algorithmes à collisions nulles. Leur principe consiste à ajouter aux événements d'absorption et de diffusion un troisième type de collision sans effet sur le transfert du radiatif (ces collisions, dites nulles, peuvent être assimilées à des événements de diffusion vers l'avant). Puisque sans effet sur la physique du transport, elles peuvent être choisies arbitrairement de sorte à rendre le coefficient d'extinction résultant de ces trois types de collisions uniforme et ainsi permettre une résolution de l'équation du transfert radiatif rigoureuse, quels que soient les champs de propriétés utilisés en entrée. D'un point de vue purement statistique, ces collisions permettent, par l'introduction d'une récursivité, de passer outre la non-linéarité du terme exponentiel d'extinction présent dans l'équation du transfert radiatif. Ces algorithmes à collisions nulles ont alors été mis en œuvre dans l'étude d'un bilan radiatif au sein d'un milieu tridimensionnel, absorbant, émettant et diffusant, entouré par des parois réfléchissantes. Ces travaux ont donné lieu à une étude paramétrique permettant d'évaluer, entre-autres, l'influence non-négligeable du choix arbitraire du coefficient de collision nulle sur le taux de convergence de l'algorithme. Enfin,

6. Plusieurs dizaines de collisions pour chaque réalisation de l'algorithme de Monte-Carlo (quelques millions).

puisque ne faisant appel à aucune approximation, cette méthode a été utilisée pour valider un code de calcul radiatif approché dans une géométrie réaliste de chambre de combustion.

CHAPITRE 5

Intégration spectrale par échantillonnage des transitions

Introduction	138
5.1 Intégration spectrale d'observables radiatives en milieu gazeux	139
5.1.1 Représentations usuelles du coefficient d'absorption	139
5.1.2 Reformulation statistique du coefficient d'absorption	141
5.1.3 Non-linéarité du terme d'extinction	143
5.2 Algorithmes à collisions nulles avec échantillonnage des transitions	145
5.2.1 Représentation statistique du coefficient d'absorption dans l'équation du transfert radiatif	145
5.2.2 Perspectives numériques et analytiques offertes par cette approche	151
5.2.3 Gestion des coefficients négatifs de collision nulle	152
5.2.4 Proposition d'améliorations algorithmiques	153
5.3 Mise en pratique dans un benchmark et choix des paramètres libres	154
5.3.1 Présentation des six configurations d'étude	156
5.3.2 Approche par variance nulle afin d'orienter le choix des probabilités	157
5.3.3 Choix des paramètres libres	161
5.3.4 Résultats obtenus pour les cas d'étude considérés	169
5.3.5 Coefficients $h_{n,m,i,\eta}$ négatifs et événements rares	173
Résumé du chapitre	176

Introduction

Dans le chapitre précédent, les algorithmes à collisions nulles ont été introduits pour traiter la dépendance spatiale des propriétés du milieu. Il devient désormais possible, par l'ajout de collisions fictives, de se passer d'une discrétisation préalable des champs de propriétés, tout en assurant le caractère de calcul de référence des méthodes de Monte-Carlo. Ces algorithmes n'ont été, jusqu'alors, présentés que pour traiter des grandeurs radiatives monochromatiques.

Toutefois, quels que soient les domaines applicatifs, ce sont généralement des grandeurs intégrées sur une plage de nombres d'onde qui intéressent les spécialistes. Or, cette intégration constitue usuellement l'étape la plus limitante et la plus délicate à mettre en œuvre, à cause de la complexité qu'impliquent les dépendances spectrales des différentes propriétés optiques. Il faut en effet, pour résoudre l'équation du transfert radiatif, être capable de représenter ou de modéliser ces dépendances pour chacun des termes la composant (coefficients d'absorption, de diffusion, luminance d'équilibre, fonction de phase, *etc.*). Cette forte complexité est en particulier rencontrée lorsque l'on tente de décrire le coefficient d'absorption, qui, en plus d'avoir une dépendance spatiale (ou plutôt une dépendance aux conditions locales de température, de pression et de composition chimique), dépend de façon particulièrement prononcée du nombre d'onde (voir [Chap. 2](#)).

Aussi, l'objet de ce chapitre va être de proposer une approche permettant de traiter statistiquement, lors d'un calcul de grandeur intégrée spectralement, le coefficient d'absorption et ses dépendances spatiales et spectrales. Notre motivation est, ici encore, de reformuler le problème lié à cette forte complexité sous un aspect purement statistique et d'étudier les avantages que pourrait offrir une telle approche. Nous allons alors voir comment les algorithmes à collisions nulles permettent de repenser de façon statistique, directement au sein de l'équation du transfert radiatif, l'expression du coefficient d'absorption. Cela conduira alors au développement d'algorithmes de Monte-Carlo évaluant de façon non biaisée une observable intégrée spectralement sans nécessiter une production préalable de spectres d'absorption ou de modèles spectraux simplifiés. Les propriétés optiques seront reconstruites statistiquement au cours du calcul par un échantillonnage des transitions moléculaires, directement réalisé depuis les bases de données spectroscopiques. Ces algorithmes ne feront appel à aucune des approximations couramment utilisées et conserveront ainsi leur statut de solutions de référence.

Ce chapitre est divisé en trois parties. Dans un premier temps, un bref état de l'art relatif à la représentation spectrale des coefficients d'absorption sera présenté. Puis, nous montrerons comment il est possible de repenser de façon statistique l'idée même de coefficient d'absorption. Nous mettrons également en évidence, le problème de non-linéarité qu'entraîne cette reformulation du coefficient d'absorption, au sein de l'équation du transfert radiatif.

La seconde section, essentiellement formelle, aura pour objet de montrer comment les algorithmes à collisions nulles permettent une nouvelle fois de passer outre ce

caractère non-linéaire. Un algorithme à collisions nulles, basé sur un échantillonnage des transitions depuis des bases de données spectroscopiques, sera alors proposé et une discussion des perspectives qu'entraînent cette nouvelle approche sera effectuée.

Enfin, dans la troisième partie, nous mettrons en pratique cette approche sur six cas d'étude couvrant différentes problématiques de combustion. Une partie importante de cette section sera consacrée aux choix de nombreux paramètres libres requis par l'approche proposée, n'ayant aucune incidence sur le caractère exact de la méthode, mais conditionnant de façon importante le taux de convergence de l'algorithme de Monte-Carlo.

Nous nous concentrerons pendant tout ce chapitre sur l'étude d'un milieu non-diffusant. En effet, l'ajout d'événements de diffusion n'apporterait pas d'intérêt particulier à l'approche proposée ici, ni de difficultés supplémentaires (voir [Chap. 4](#)).

5.1 Intégration spectrale d'observables radiatives en milieu gazeux

5.1.1 Représentations usuelles du coefficient d'absorption

Lorsqu'il s'agit d'aborder des problématiques de rayonnement thermique en milieu gazeux (analyse expérimentale, simulation, inversion, *etc.*), les ingénieurs et physiciens s'appuient directement ou indirectement sur des bases de données spectroscopiques [[Jacquinet-Husson et al., 2011](#), [Rothman et al., 2010](#), [Rothman et al., 2013](#), [Tashkun et Perevalov, 2011](#)]. Ces bases de données, produites par une communauté très active de spectroscopistes, rassemblent, pour de nombreuses espèces moléculaires et pour un nombre considérable de transitions, plusieurs paramètres (voir [Sec. 2.3.3](#)) permettant de décrire les phénomènes d'absorption et d'émission d'un gaz. Toutefois, même pour les gaz les plus simples à des températures faibles, le nombre de transitions moléculaires à prendre en compte est extrêmement important (les paramètres de plus de 600 millions de transitions moléculaires sont représentés pour la seule molécule de CO_2 dans la base de données CDSD-4000 [[Tashkun et Perevalov, 2011](#)]). Traiter cette quantité conséquente d'information représente alors une tâche particulièrement fastidieuse.

En effet, le coefficient d'absorption que l'on cherche à représenter à partir de ces bases, dépend à la fois de la température, de la pression, du mélange gazeux et du nombre d'onde. Pour produire un unique spectre d'absorption (c'est-à-dire pour une température, une pression et un mélange fixés), il est nécessaire de sommer de façon déterministe, en chaque nombre d'onde, l'ensemble des contributions d'absorption de chaque transition. La variation spectrale du coefficient d'absorption étant très prononcée, ce calcul doit être réalisé sur des pas spectraux très petits. On considère généralement, qu'à pression atmosphérique, la résolution d'un spectre d'absorption doit être de 0.01cm^{-1} pour décrire correctement ces variations. Cela signifie que la production d'un spectre d'absorption couvrant tout le domaine infrarouge nécessite entre 10^6 et 10^7 calculs de coefficients d'absorption (chacun

consistant à sommer plusieurs milliers, voire plusieurs millions de participations de raies). De tels spectres sont qualifiés de spectres haute-résolution. Dans le but de rendre cette somme plus aisée, le modèle spectroscopique est souvent simplifié afin d'avoir à sommer en chaque nombre d'onde une quantité plus faible de transitions (*ex* : prise en compte uniquement des transitions ayant une intensité supérieure à un seuil donné, troncature des ailes de raie, *etc.*). Cependant, même avec ces allègements, la production de spectres haute-résolution demeure très coûteuse et nécessite d'être reproduire à chaque changement de modèle de raie, d'hypothèse spectrale, ou encore à chaque nouvelle version de base de données spectroscopique.

Une fois ces spectres d'absorption haute-résolution produits, deux pratiques sont couramment rencontrées pour prendre en compte leur information spectrale dans le calcul d'une observable radiative. La première consiste à simplifier ces spectres par des modèles approchés. Un grand nombre de modèles spectraux ont été développés au cours des dernières décennies, devenant de plus en plus précis et de plus en plus performants. Néanmoins, le passage d'un spectre haute-résolution à un spectre simplifié se traduit nécessairement par une perte d'information qui n'est pas acceptable lorsqu'il s'agit de proposer des solutions de référence. La seconde pratique consiste à extraire, directement lors du calcul d'une observable radiative, les coefficients d'absorption contenus dans ces spectres ; on parle alors d'approche raie-par-raie. Ces approches, beaucoup plus lourdes en termes de mise en œuvre que les modèles spectraux simplifiés, sont aujourd'hui considérées comme solutions de référence. Toutefois, lors du calcul radiatif, il est nécessaire, pour obtenir la valeur du coefficient d'absorption en un point donné, de recourir à une interpolation selon un jeu de pressions, de températures, de concentrations moléculaires et de nombres d'onde. Cette étape peut, si la résolution du jeu de spectres (relative aux conditions thermodynamiques ou aux nombres d'onde) est trop faible, conduire à un léger biais de l'estimation de la grandeur d'intérêt. Une autre solution consisterait à calculer rigoureusement, au fil du calcul, le coefficient d'absorption à partir des bases de données spectroscopiques. Les incertitudes dues aux procédures d'interpolation disparaîtraient alors. En pratique, cette solution n'est jamais adoptée car les temps de calcul deviennent très vite excessifs. On préfère généralement, dans des motivations de calcul de référence, l'utilisation de spectres haute-résolution qui offrent l'avantage supplémentaire de pouvoir être réutilisés d'une simulation à l'autre.

La quantité conséquente d'information contenue dans ces bases de données a toujours motivé la communauté de la spectroscopie moléculaire à proposer des représentations statistiques. Les exemples les plus significatifs correspondent au développement de modèles statistiques qui permettent l'évaluation de transmissivités moyennées par bande spectrale, à partir de pondérations des intensités ou des largeurs de raies. Cependant, en pratique cette relation directe entre statistiques de raies et transmissivités moyennes s'est perdue rapidement. L'idée d'utiliser des modèles statistiques est restée, notamment avec les travaux de Malkmus ([Malkmus, 1967]), mais ces modèles se sont de plus en plus appuyés sur les spectres d'absorption haute-résolution et non sur les paramètres de transition eux-mêmes. Plus tard, le développement des *k*-distributions [Lacis et Oinas, 1991, Taine et Soufiani, 1999] a

poursuivi cette même logique : les approches restent statistiques mais elles sont désormais uniquement basées sur des spectres haute-résolution, calculés de façon déterministe.

Nous soutenons ici que l'on peut attendre d'importants bénéfices, tant numériques qu'en termes d'analyse, si l'on supprime cette étape déterministe de production de spectres haute-résolution. Une part de ces bénéfices est illustrée dans [Feldick et Modest, 2011, Ren et Modest, 2013], où il est montré que la complexité liée à l'intégration spectrale par échantillonnage des nombres d'onde est mieux traitée en s'appuyant sur les paramètres de transitions plutôt qu'en restant au niveau des spectres d'absorptions [Modest, 1992].

5.1.2 Reformulation statistique du coefficient d'absorption

En négligeant les effets de "line-mixing" (voir Sec. 2.3.3.1), le coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ pour un nombre d'onde η , au point \mathbf{x} s'exprime comme la somme des contributions $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ de l'ensemble des transitions énergétiques i de toutes les espèces moléculaires m en présence :

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) \quad (5.1)$$

où N_m est le nombre d'espèces moléculaires et $N_i(m)$ est le nombre de transitions pour une espèce m donnée. Puisque cette expression ne constitue qu'une double somme, il est possible de l'exprimer comme une espérance par l'introduction de probabilités arbitraires associées à chaque espèce moléculaire $\mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{P}_{m,\eta}(\mathbf{x})$ et à chaque transition $\mathcal{P}_i(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{P}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ d'une espèce moléculaire donnée :

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}) \left[\frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{\mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_i(\mathbf{x})} \right] = \mathbb{E} \left[\frac{h_{a,\mathcal{M},\mathcal{I},\eta}(\mathbf{x})}{\mathcal{P}_M(\mathbf{x})\mathcal{P}_I(\mathbf{x})} \right] \quad (5.2)$$

Les indices m des espèces moléculaires ainsi que les indices i des transitions constituent alors des variables aléatoires discrètes, respectivement notées \mathcal{M} et \mathcal{I} , définies par les probabilités \mathcal{P}_m et \mathcal{P}_i .

L'essentiel de la proposition faite dans ce chapitre réside dans cette simple reformulation statistique. Une conséquence directe de cette reformulation est qu'il devient possible, en pratique, d'estimer le coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ pour un nombre d'onde donné ou même de reconstruire un spectre (voir Fig. 5.1) de façon totalement stochastique par un algorithme de Monte-Carlo. Cet algorithme consisterait à réaliser un grand nombre N_{mc} de fois et de manière indépendante les étapes suivantes :

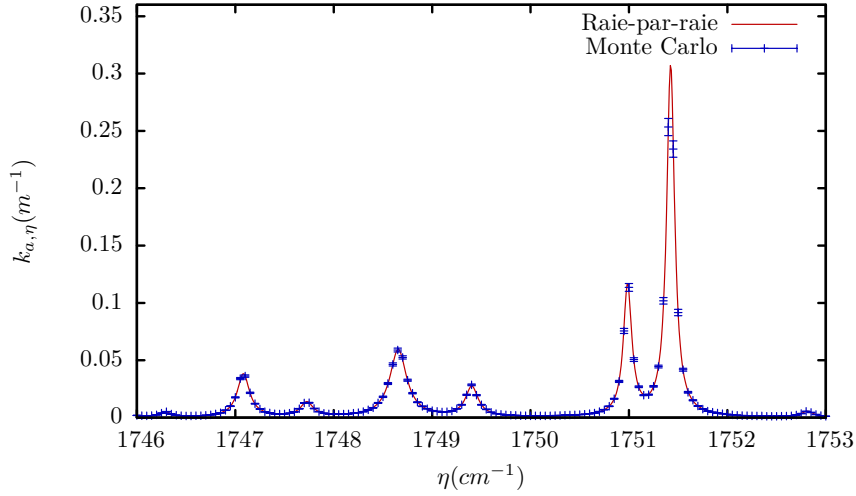


FIGURE 5.1 – Spectres d’absorption calculés avec une approche raie-par-raie et par un algorithme de Monte-Carlo (valeurs données avec leurs intervalles de confiance obtenus avec 1000 réalisations indépendantes). Le mélange considéré est composé de CO_2 et de H_2O (de fractions molaires respectives $\chi_{\text{CO}_2} = 2.87E-4$ et $\chi_{\text{H}_2\text{O}} = 2.25E-2$) à une température de $294K$ et une pression de 1atm . Les bases de données spectroscopiques CDSD1000 et HITEMP ont été utilisées pour réaliser ce calcul.

ALGORITHME

1. Échantillonner une molécule m_i parmi l’ensemble des N_m molécules selon les probabilités discrètes $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ associées à chacune des molécules
2. Échantillonner une transition ν_i parmi l’ensemble des $N_\nu(m_i)$ transitions de la molécule m_i selon les probabilités discrètes $\mathcal{P}_\nu(\mathbf{x})$ associées à chacune des transitions de la molécule m_i
3. Calculer le poids de Monte-Carlo : $w_i = h_{a,m_i,\nu_i,\eta}(\mathbf{x}) / \mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_\nu(\mathbf{x})$ en accord avec le modèle de raie considéré, directement à partir des paramètres de transitions contenus dans la base spectroscopique d’intérêt.

L’estimation du coefficient d’absorption par cet algorithme est alors donnée par la moyenne arithmétique des N_{mc} poids w_i . Il est également possible d’estimer l’écart-type associé à cette estimation. En d’autres termes, il n’est pas nécessaire de prendre en compte l’ensemble des transitions pour estimer $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$, mais d’en échantillonner un nombre suffisant pour lesquelles on calcule au fil de la simulation les contributions $h_{a,m_i,\nu_i,\eta}(\mathbf{x})$ à partir des bases de données spectroscopiques retenues. La convergence de l’algorithme sera alors entièrement conditionnée par le choix des $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et des $\mathcal{P}_\nu(\mathbf{x})$ (qui devront être attribuées à chaque espèce et à chaque transition avant ou pendant le calcul).

Les éléments de physique statistique nous permettent de considérer que l’ensemble des molécules et l’ensemble des transitions énergétiques sont représentés en \mathbf{x} avec des probabilités de présence plus ou moins importantes. Les images physiques associées à cet exercice de reformulation résident alors simplement dans le fait de sélectionner de

façon aléatoire plusieurs molécules ayant des états énergétiques donnés pour estimer le coefficient d'absorption global $k_{a,\eta}$.

5.1.3 Non-linéarité du terme d'extinction

Si l'on s'arrêtait à ce stade, l'intérêt de considérer statistiquement les coefficients d'absorption demeurerait limité. Notre souhait est d'introduire directement dans l'équation du transfert radiatif une description statistique des coefficients d'absorption pour permettre une intégration spectrale ne requérant ni approximation (liée à une éventuelle interpolation), ni calcul préalable de spectres d'absorption haute-résolution.

Pour mettre en évidence les difficultés qu'entraîne cette introduction, considérons la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, intégrée spectralement entre η_{\min} et η_{\max} dans un milieu infini, non-diffusant et homogène (le coefficient d'absorption est uniforme). Dans ces conditions, cette luminance peut être exprimée comme :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} d\eta \int_0^{+\infty} dl k_{a,\eta} \exp(-k_{a,\eta} l) L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) \quad (5.3)$$

Reformuler cette équation comme une expression statistique ne pose pas de problème majeur dès lors que l'on considère les nombres d'onde comme une variable aléatoire à laquelle on associe une densité de probabilité arbitraire $p_H(\eta)$. Il vient alors :

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) d\eta \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}}(l) dl \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0)}{p_H(\eta)} \\ &= \mathbb{E} \left[\frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0)}{p_H(\eta)} \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

où $p_{\mathcal{L}}(l) = k_{a,\eta} \exp(-k_{a,\eta} l)$ est la densité de probabilité des libres parcours \mathcal{L} .

La transposition de cette expression en un algorithme de Monte-Carlo est donc aisée. Chacune de ses réalisations indépendantes consiste à échantillonner un nombre d'onde η_i selon $p_H(\eta)$ et un libre parcours l_i selon $p_{\mathcal{L}}(l)$; le poids de Monte-Carlo de la réalisation indépendante i est alors donné par $w_i = L_{\eta_i}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l_i\mathbf{u}_0)/p_H(\eta_i)$. Toutefois, en l'état, l'Eq. 5.3 et son algorithme correspondant, imposent que la valeur de $k_{a,\eta}$ soit connue pour tout nombre d'onde η . La mise en œuvre pratique de cet algorithme nécessiterait de façon classique la production rigoureuse d'un spectre d'absorption défini à haute-résolution pour les conditions de température, de pression et de composition chimique du cas d'étude. Celui-ci devrait alors être interpolé spectralement pour obtenir la valeur du coefficient d'absorption pour un nombre d'onde η_i donné. Si les propriétés du milieu n'étaient pas uniformes, il serait nécessaire de produire un nombre suffisant de spectres pour couvrir ces hétérogénéités de température, de pression et de composition moléculaire. Pour remonter à la valeur de $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ pour un point et un nombre d'onde donnés, il serait alors nécessaire d'interpoler ce jeu de spectres à la fois spectralement mais également spatialement (ou selon la pression, la température et les fractions molaires d'espèces).

Mais nous soutenons ici, qu'il est possible de se passer de cette production rigoureuse de spectres haute-résolution par un traitement statistique de l'expression des coefficients d'absorption. Il est possible de remplacer dans l'Eq. 5.3 les coefficients d'absorption $k_{a,\eta}$ par leur expression statistique donnée à l'Eq. 5.2. Il vient alors :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} d\eta \int_0^{+\infty} dl \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i \frac{h_{a,m,i,\eta} L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0)}{\mathcal{P}_m \mathcal{P}_i} \times \exp \left(- \sum_{m'=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m'} \sum_{i'=1}^{N_i(m')} \mathcal{P}_{i'} \frac{h_{a,m',i',\eta} l}{\mathcal{P}_{m'} \mathcal{P}_{i'}} \right) \quad (5.5)$$

Pour passer à une expression de la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ sous forme d'espérance, il est nécessaire d'introduire deux densités de probabilité arbitraires : $p_H(\eta)$ associée aux nombres d'onde et $\tilde{p}_{\mathcal{L}}(l)$ associée aux libres parcours. On obtient alors

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) d\eta \int_0^{+\infty} \tilde{p}_{\mathcal{L}}(l) dl \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i \frac{h_{a,m,i,\eta} L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0)}{p_H(\eta) \tilde{p}_{\mathcal{L}}(l) \mathcal{P}_m \mathcal{P}_i} \times \exp \left(- \sum_{m'=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m'} \sum_{i'=1}^{N_i(m')} \mathcal{P}_{i'} \frac{h_{a,m',i',\eta} l}{\mathcal{P}_{m'} \mathcal{P}_{i'}} \right) \quad (5.6)$$

qui, sous forme d'espérance, donne

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} \left[\frac{h_{a,\mathcal{M},\mathcal{I},H} L_H^{eq}(\mathbf{x}_0 - \mathcal{L}\mathbf{u}_0)}{p_H(H) \tilde{p}_{\mathcal{L}}(\mathcal{L}) \mathcal{P}_m \mathcal{P}_i} \exp \left(- \mathbb{E} \left[\frac{h_{a,\mathcal{M}',\mathcal{I}',H} \mathcal{L}}{\mathcal{P}_{m'} \mathcal{P}_{i'}} \right] \right) \right] \quad (5.7)$$

Nous nous retrouvons alors exactement dans la même configuration que lorsque nous souhaitions traiter les hétérogénéités des propriétés radiatives du milieu (voir Sec. 4.1.3) : *l'extinction exponentielle introduit une non-linéarité* dans l'expression statistique de la luminance. Cette non-linéarité ne nous permet donc pas de proposer directement un unique algorithme de Monte-Carlo pour estimer $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Il serait en effet nécessaire d'effectuer une simulation complète pour estimer l'épaisseur optique $\mathbb{E}[(h_{a,\mathcal{M}',\mathcal{I}',H} l) / (\mathcal{P}_{m'} \mathcal{P}_{i'})]$ à chacune des N_{mc} réalisations indépendantes de l'algorithme estimant $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (ce qui se traduirait par des temps de calcul excessifs).

Toutefois, le chapitre précédent a mis en évidence que les algorithmes à collisions nulles permettent, par la définition d'un champ d'extinction arbitraire \hat{k}_{η} , de contourner la non-linéarité causée par cette fonction exponentielle. En effet, dans ce type d'algorithme, le terme d'extinction ne dépend plus du coefficient d'absorption mais simplement de \hat{k}_{η} qui, lui, est totalement arbitraire. Nous proposons donc de recourir, à nouveau, aux algorithmes à collisions nulles pour décomposer, directement dans l'équation du transfert radiatif, le coefficient d'absorption comme une somme statistique des participations $h_{a,m,i,\eta}$ de chaque transition. Cela ouvre la voie à des algorithmes de Monte-Carlo permettant de traiter les dépendances spatiales et spec-

trales des coefficients d'absorption sans avoir à recourir ni à un maillage volumique ni à des spectres d'absorption haute-résolution.

5.2 Algorithmes à collisions nulles avec échantillonnage des transitions moléculaires

5.2.1 Représentation statistique du coefficient d'absorption dans l'équation du transfert radiatif

Dans le cas d'un milieu infini, hétérogène et non-diffusant, l'introduction d'un coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}(\mathbf{x})$ dans le champ d'extinction (désormais défini comme $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{n,\eta}(\mathbf{x})$) conduit à la formulation intégrale de la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ suivante :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} d\eta \int_0^{+\infty} dl_1 \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1) \exp\left(-\int_0^{l_1} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_0 - l'_1 \mathbf{u}_0) dl'_1\right) \times \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) + \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1)} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \right] \quad (5.8)$$

avec $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - l_{j+1} \mathbf{u}_0$ (sans diffusion, la direction \mathbf{u}_0 reste inchangée) et où le terme récursif $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)$ est défini par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} dl_{j+1} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp\left(-\int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1} \mathbf{u}_0) dl'_{j+1}\right) \times \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) + \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0) \right] \quad (5.9)$$

On note alors que grâce à l'introduction des collisions nulles, les coefficients d'absorption ne sont désormais présents que dans les expressions de l'albédo d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)$ et de l'albédo de collision nulle $k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)$ (par l'intermédiaire du coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) - k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)$ qui n'est jamais explicitement calculé). Le problème de non-linéarité qu'entraînait le terme d'extinction a ainsi été surmonté.

Il devient alors possible de décomposer les coefficients d'absorption en somme de participations de chaque transition :

$$k_{a,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) \quad (5.10)$$

De la même façon, il est possible de décomposer le coefficient arbitraire de collision

nulle en une somme de participations de chaque transition à ce coefficient :

$$k_{n,\eta}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) \quad (5.11)$$

où $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ est la participation de la transition i de la molécule m au coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}(\mathbf{x})$. On peut également définir un coefficient

$$\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x}) = h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) + h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) \quad (5.12)$$

qui correspondrait au coefficient d'extinction associé à une transition i particulière et qui validerait donc $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} \hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$. La décomposition de ces propriétés radiatives est illustrée par la Fig. 5.2. Les choix de $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ et $\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ sont totalement libres, à la seule condition qu'ils valident respectivement les Eq. 5.11 et 5.12.

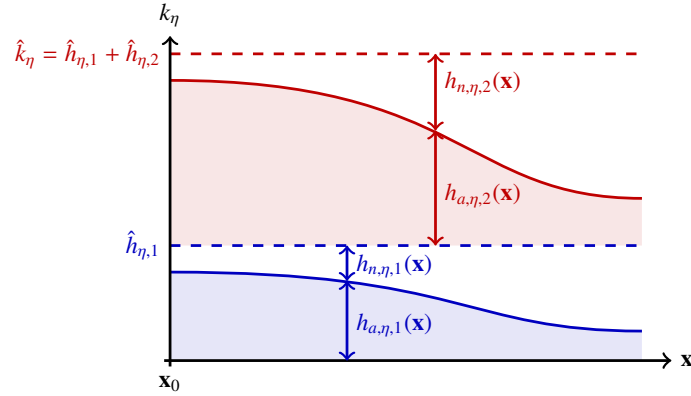


FIGURE 5.2 – Décomposition du champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ en une somme de $\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ définis pour chaque transition moléculaire i de chaque espèce m . Le coefficient $\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ est lui-même divisé en une composante d'absorption $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ (calculable directement à partir de bases de données spectroscopiques) et d'une contribution au coefficient de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ arbitraire. Cette figure illustre le cas fictif, d'un gaz monomoléculaire ne comportant que deux transitions (numérotées 1 et 2) pour un nombre d'onde η donné.

NOTE : Reformulation de l'équation locale du transfert radiatif

Si l'on se ramène à l'écriture différentielle de l'équation du transfert radiatif, la décomposition des coefficients d'absorption et de collision nulle en une somme de participations de chaque transition moléculaire consiste à transformer l'Eq. 4.13 rappelée ci-dessous pour un cas non-diffusant :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = -\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + k_{a,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) + k_{n,\eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \quad (5.13)$$

en

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= -\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ &+ \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} \left[h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}) + h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}') L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

Dans cette expression, le terme d'extinction $-\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ ne dépend plus de $k_{a,\eta}$ mais du champ arbitraire d'extinction \hat{k}_η . C'est cette propriété qui, une fois l'équation du transfert radiatif exprimée sous sa forme intégrale, permet de rendre le terme exponentiel d'extinction analytiquement calculable, et permettra de traiter la non-linéarité exposée à la [Sec. 5.1.3](#).

Cette décomposition des coefficients d'absorption et de collision nulle conduit donc, avec l'introduction de probabilités arbitraires $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ (respectivement associées à chaque espèce moléculaire m et à chaque transition i), à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_1) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_1) \\ &\times \left[\frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_1) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_1)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) + \frac{h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_1) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_1)} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \right] \end{aligned} \quad (5.15)$$

où $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l'_j \mathbf{u}_0) dl'_j\right)$ est la densité de probabilité des libres parcours \mathcal{L}_j et où le terme récursif $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)$ est donné par :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1}) \\ &\times \left[\frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) + \frac{h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0) \right] \end{aligned} \quad (5.16)$$

On retrouve alors une expression très proche de celle des algorithmes à collisions nulles usuels. En posant

$$\hat{h}_\eta(\mathbf{x}) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j), \quad (5.17)$$

les termes $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) / [\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x})]$ et $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) / [\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x})]$ correspondent alors respectivement à l'équivalent d'albédos d'absorption et de collision nulle, mais ici associés à la seule transition i de l'espèce m . Dans la mesure où $\sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}) = 1$, cette expression valide bien la condition imposée par les [Eq. 5.11](#) et [5.12](#). Ce choix fait pour l'expression de $\hat{h}_\eta(\mathbf{x})$ présente un avantage supplémentaire : seuls le champ de \hat{k}_η et les différentes probabilités devront être

définies au préalable de façon arbitraire, évitant ainsi de devoir proposer pour chaque transition, pour chaque nombre d'onde et chaque position une valeur de $h_{n,\eta}(\mathbf{x})$ validant l'Eq. 5.11.

De la même manière qu'au Chap. 4, il est possible d'exprimer sous forme statistique ces albédos en introduisant dans l'Eq. 5.15

- une probabilité d'absorption $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{P}_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x})\mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_i(\mathbf{x})} = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})}$
- une probabilité de collision nulle $\mathcal{P}_{n,i}(\mathbf{x}) = 1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x})$
- ainsi qu'une densité de probabilité des nombres d'onde $p_H(\eta)$ arbitraire.

Il vient alors :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) \frac{1}{p_H(\eta)} d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_1) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_1) \quad (5.18)$$

$$\times [\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_1) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) + (1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_1)) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0)]$$

où le terme récursif $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)$ est donné par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1}) \quad (5.19)$$

$$\times [\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) + (1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{j+1})) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0)]$$

Toutefois, la définition de la probabilité $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x})$ impose que $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) < \hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ pour qu'elle soit bien comprise entre 0 et 1. Il est donc nécessaire que pour toute transition moléculaire le coefficient $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ soit positif pour tout nombre d'onde η et en toute position \mathbf{x} . Nous retrouvons ainsi les mêmes conclusions que pour les algorithmes à collisions nulles usuels (voir Sec. 4.2.4). Nous reviendrons sur cet élément limitant dans la Sec. 5.2.3 et proposerons à l'instar de la Sec. 4.2.4 une alternative permettant d'autoriser localement des occurrences négatives de $h_{n,m,i,\eta}$.

La formulation intégrale récursive de l'Eq. 5.18 nous permet alors d'exprimer la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ comme une simple espérance :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} \left[\frac{L^{eq}(\mathbf{X}^*)}{p_H(\eta)} \right] \quad (5.20)$$

où la variable aléatoire \mathbf{X}^* correspond aux positions d'émission et peut être définie comme :

$$\mathbf{X}^* = \sum_{j=1}^{+\infty} \mathbf{X}_j A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \quad (5.21)$$

avec $A_j \equiv A_{j,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)$ la variable aléatoire associée aux événements d'absorption. Tout comme pour les algorithmes à collisions nulles usuels, elle vaut 1 avec une

probabilité $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)$, 0 sinon, mais elle dépend désormais, en plus de la position \mathbf{X}_j des indices d'espèces moléculaires \mathcal{M} et des indices de transitions \mathcal{I} .

On constate alors l'intérêt qu'offre cette reformulation. Celle-ci ne dépend plus du coefficient d'absorption, mais seulement des participations $h_{a,m,i,\eta}$ de chaque transition présentes dans les probabilités d'absorption et du champ arbitraire \hat{k}_η . L'information, habituellement portée par le coefficient d'absorption dans les approches statistiques usuelles, est maintenant reconstruite de façon stochastique par une combinaison de transitions moléculaires. Les algorithmes à collisions nulles permettent de réaliser cette tâche grâce aux propriétés suivantes :

- l'unique fonction exponentielle de l'équation du transfert radiatif, présente dans l'expression de $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j)$ ne dépend plus que du coefficient d'extinction \hat{k}_η qui est choisi arbitrairement ;
- $k_{a,\eta}$, apparaît uniquement et de façon linéaire dans les probabilités d'absorption et de collision nulle ;
- grâce à cette linéarité, $k_{a,\eta}$ peut être remplacé par une expression statistique de transitions (comme proposé dans [Feldick et Modest, 2011, Ren et Modest, 2013]) ;
- la non-linéarité de l'exponentielle est reconstruite par la récursion associée aux événements de diffusion vers l'avant que constituent les collisions nulles [Longo, 2002, Galtier *et al.*, 2013].

Puisqu'exprimée sous la forme d'une simple espérance, la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ peut alors être estimée sans biais par un simple algorithme de Monte-Carlo, composé de N_{mc} réalisations indépendantes (indicées i et schématisées à la Fig. 5.3), chacune composée des étapes suivantes :

ALGORITHME

1. L'indice de collision est initialisé : $j = 0$;
2. On échantillonne un nombre d'onde η_i entre η_{\min} et η_{\max} selon la densité de probabilité arbitraire $p_H(\eta)$;
3. On échantillonne un libre parcours d'extinction $l_{i,j+1}$ entre 0 et $+\infty$ selon la densité de probabilité arbitraire $\hat{p}_{\mathcal{L}}(l)$ et on calcule la position de collision : $\mathbf{x}_{i,j+1} = \mathbf{x}_{i,j} - l_{i,j+1}\mathbf{u}_{i,j}$;
4. On échantillonne une espèce moléculaire $m_{i,j}$ parmi l'ensemble des espèces N_m , selon les probabilités discrètes $\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{i,j+1})$ associées à chacune des molécules ;
5. On échantillonne une transition moléculaire $i_{i,j+1}$ parmi l'ensemble des transitions $N_i(m_{i,j+1})$ de l'espèce $m_{i,j+1}$, selon les probabilités discrètes $\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{i,j+1})$;
6. On effectue un test de Bernoulli pour déterminer le type de collision. Pour cela on échantillonne uniformément un nombre $r_{i,j+1}$ entre 0 et 1.

- 6a.** Si $r_{i,j+1} < \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{i,j+1})$, il s'agit d'une absorption et la récursion s'arrête. Le poids de Monte-Carlo de la réalisation indépendante i est alors donné par : $w_i = Leq_\eta(\mathbf{x}_{j+1})/p_H(\eta_i)$.
- 6b.** Si $r_{i,j+1} > \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{i,j+1})$, il s'agit d'une collision nulle, l'algorithme boucle alors à l'étape 3, avec un indice de collision incrémenté $j \equiv j + 1$.

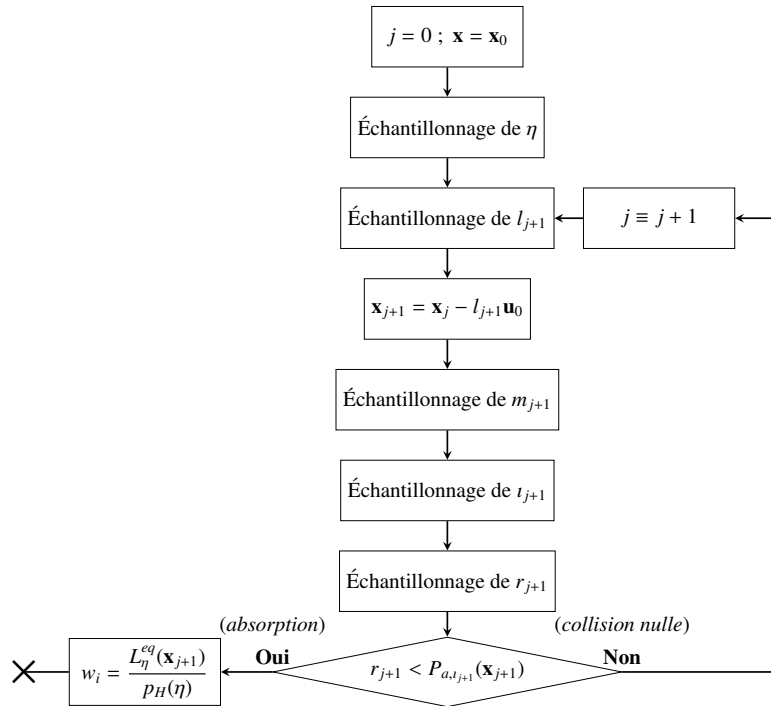


FIGURE 5.3 – Algorithme à collisions nulles avec échantillonnage des transitions permettant d'estimer la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu infini non-diffusant. Outre l'ajout d'un échantillonnage des nombres d'onde η permettant d'intégrer spectralement la luminance d'intérêt, cet algorithme est très proche d'un algorithme à collisions nulles usuel. Seules deux étapes d'échantillonnage de l'espèce moléculaire m et de la transition ι sont rajoutées.

Cet algorithme est alors très similaire aux algorithmes usuels de diffusion multiple (voir Fig. 3.6), à la seule différence qu'une espèce moléculaire et qu'une transition sont échantillonnées à chaque collision. Toutefois, la proposition de reformulation statistique faite dans ce chapitre mène à de nouvelles images physiques. Ces dernières consistent à suivre depuis \mathbf{x}_0 dans la direction $-\mathbf{u}_0$ des photons de nombres d'onde η compris entre η_{\min} et η_{\max} , jusqu'à ce qu'ils collisionnent en \mathbf{x}_1 avec une molécule donnée, d'espèce m et d'état énergétique correspondant à la transition ι . Il y a une probabilité $\mathcal{P}_{a,i}$ que cette collision soit une absorption, auquel cas le suivi s'arrête. La collision peut également être une collision nulle (avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_{a,i}$), auquel cas, les photons poursuivent leur chemin dans la direction $-\mathbf{u}_0$ jusqu'à un

second point de collision \mathbf{x}_2 où il peut y avoir absorption ou collision nulle. Le suivi est alors stoppé lorsqu'une absorption est rencontrée.

5.2.2 Perspectives numériques et analytiques offertes par cette approche

Avec cette approche, toute observable radiative peut ainsi être vue comme l'espérance d'une variable aléatoire, définie uniquement à partir de propriétés des transitions moléculaires. La complexité du transfert radiatif en milieu hétérogène ainsi que celle liée aux transitions moléculaires ont ainsi pu être réduites à un simple problème d'estimation d'espérance, grâce à l'introduction de ces collisions nulles.

Comme cela va être illustré par la suite, la proposition faite ici a des conséquences numériques immédiates. Il n'est plus nécessaire, pour réaliser un calcul de référence de produire rigoureusement des spectres de haute-résolution, suffisamment nombreux pour couvrir les hétérogénéités du milieu. A fortiori, ces jeux de spectres ne doivent pas être recalculés à chaque changement de configuration d'étude ou d'hypothèse relative au modèle spectral (profil de raie, troncature, bases de données spectroscopiques utilisées, *etc.*).

De plus, les étapes d'interpolations spatiales et spectrales, permettant d'obtenir la valeur locale d'un coefficient d'absorption à partir d'un jeu de spectres précalculés, ne sont plus nécessaires. Les estimations ne sont alors plus susceptibles d'être affectées par d'éventuels biais dus à ces procédures d'interpolations. À chaque collision, une transition est échantillonnée et sa contribution $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ est calculée pour les conditions exactes de température, de pression et de fractions molaires au point \mathbf{x} .

Il devient ainsi imaginable, sans avoir à chaque fois à produire un jeu de spectres à haute-résolution spectrale, de comparer des valeurs d'observables radiatives obtenues avec différentes bases de données spectroscopiques ou avec différentes hypothèses spectrales (*ex* : profil de Voigt ou de Lorentz, sélection des raies les plus intenses, troncature d'ailes de raie, *etc.*). La prise en compte de nouvelles versions de bases de données spectroscopiques devient elle aussi directe.

Outre ces avantages numériques, la proposition faite ici offre des perspectives intéressantes en termes d'analyse. En effet, elle peut servir de point de départ pour des études plus théoriques. Il devient en particulier possible de calculer, par un algorithme de Monte-Carlo, la sensibilité d'une observable radiative, comme proposé dans [De Guilhem De Lataillade *et al.*, 2002a, Roger *et al.*, 2005, Dauchet *et al.*, 2013, De La Torre *et al.*, 2014], mais cette fois par rapport à un paramètre du coefficient d'absorption. Par exemple l'Eq. 5.18 peut être dérivée par rapport à un paramètre ϖ du coefficient $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$. La sensibilité paramétrique qui

en résulte (dont la démonstration est fournie en [Annexe B](#)) est donnée par :

$$\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} \left[\frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{X}^*)}{p_H(H)} \sum_{j=1}^{+\infty} \left(A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \right) \times \left[\partial_{\varpi} \ln(\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{X}_j)) + \sum_{n=1}^{j-1} \partial_{\varpi} \ln(1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{X}_n)) \right] \right] \quad (5.22)$$

Le pouvoir d'analyse qu'offre cette nouvelle approche pourrait ouvrir des perspectives intéressantes dans différents domaines. Pour des applications de type atmosphérique ou astrophysique [[Lewis et al., 1999](#), [Eymet et al., 2009](#), [Lebonnois et al., 2010](#)], il serait possible de calculer la sensibilité d'une grandeur radiative à des variables d'état thermodynamiques (*ex* : à la pression du sol pour une prise en compte des effets orographiques), ou à la concentration d'une espèce moléculaire (*ex* : le calcul de la sensibilité du flux radiatif émis par la Terre et son atmosphère vers l'espace aux concentrations de divers gaz à effets de serres tels que le CO₂, l'H₂O ou le CH₄). Ces apports pourraient également trouver une résonance en spectroscopie moléculaire. Il devient en effet possible de calculer la sensibilité de n'importe quelle grandeur radiative à un paramètre du modèle de raie. Nous pensons par exemple à l'élargissement des raies dû aux autres espèces du gaz considéré. Dans les bases de données spectroscopiques, seules les largeurs de raies dues à l'espèce elle-même et à un mélange caractéristique de l'air terrestre sont fournies. Il serait ainsi possible d'évaluer le degré de confiance que l'on peut accorder à ces paramètres dès que les mélanges gazeux considérés s'éloignent de la composition de l'air terrestre (chambres de combustion aéronautiques, atmosphères de planètes ou d'exoplanètes, *etc.*).

5.2.3 Gestion des coefficients négatifs de collision nulle

Comme souligné dans la [Sec. 5.2.1](#), le choix fait pour la probabilité d'absorption

$$\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x})\mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_i(\mathbf{x})} = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})} = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) + h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})} \quad (5.23)$$

impose que $0 < h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) < \hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ pour que la probabilité $\mathcal{P}_{a,i}$ soit bien comprise entre 0 et 1. En d'autres termes, le coefficient de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) = \hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x}) - h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ de la transition i de l'espèce moléculaire m doit être positif. Les constats sont donc identiques à ceux rencontrés à la [Sec. 4.2.4](#), mais cette fois à l'échelle d'une transition moléculaire.

Il est alors possible, de la même façon qu'à la [Sec. 4.2.4](#), d'introduire une nouvelle probabilité $\tilde{\mathcal{P}}_{a,i}(\mathbf{x})$ permettant de pouvoir gérer d'éventuelles occurrences négatives du coefficient de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$. Nous proposons l'expression :

$$\tilde{\mathcal{P}}_{a,i}(\mathbf{x}) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) + |h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})|} \quad (5.24)$$

L'expression de la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ de l'E_{q.} 5.20 est alors modifiée en :

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \mathbb{E} \left[\frac{L^{eq}(\mathbf{X}^*)}{p_H(\eta)} \sum_{j=1}^{\infty} A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \frac{h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{h}_{m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_{a,\iota}(\mathbf{x}_q)} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\frac{L^{eq}(\mathbf{X}^*)}{p_H(\eta)} \sum_{j=1}^{\infty} A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \frac{h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q) + |h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q)|}{h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q) + h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q)} \right] \quad (5.25) \\ &= \mathbb{E} \left[\tilde{W}(\mathbf{X}^*) \right] \end{aligned}$$

Ce choix de probabilité présente l'avantage de n'entraîner aucune modification algorithmique si $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}) > 0$, et modifie le poids de Monte-Carlo en conséquence si $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}) < 0$.

Ici encore, les coefficients négatifs de collision nulle $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ se traduiront par une augmentation de la variance de la variable aléatoire $\tilde{W}(\mathbf{X}^*)$. En effet à chaque collision nulle pour laquelle $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}) < 0$, la valeur absolue du produit $\prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \frac{h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q) + |h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q)|}{h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q) + h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}_q)}$ croîtra, alors qu'elle resterait fixée à 1 si $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ était positif en tout point. Si un nombre important de collisions nulles caractérisées par des coefficients négatifs se produit au sein d'une même réalisation de Monte-Carlo, alors la valeur de l'échantillon de la variable $\tilde{W}(\mathbf{X}^*)$ sera susceptible d'être très importante, augmentant alors la variance de l'estimation de $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$.

Dans le Chap. 4, il était préférable que le champ arbitraire de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ majore, quel que soit \mathbf{x} , celui du coefficient réel d'extinction. Il suffisait alors d'augmenter localement la valeur de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ pour éviter des occurrences négatives du coefficient de collision nulle. Avec la proposition faite ici, $\hat{h}_{m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ doit désormais majorer autant que possible $h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ pour tout nombre d'onde η , tout point \mathbf{x} , toute espèce moléculaire m et toute transition ι . Il est donc beaucoup plus complexe, en pratique, d'assurer strictement l'inéquation $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}) > 0$; d'autant plus que $\hat{h}_{m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ est défini comme égal à $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \mathcal{P}_\iota(\mathbf{x})$ dont chacun de ses trois termes résulte d'un choix arbitraire. Les choix du champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ et des deux probabilités ($\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_\iota(\mathbf{x})$) pourront donc avoir une incidence sur le respect ou non de la condition $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}) > 0$ pour tout η , \mathbf{x} , m et ι et ainsi avoir de sérieuses conséquences sur la convergence du calcul. Une proposition concernant ces trois termes arbitraires sera faite à la Sec. 5.3.3.

5.2.4 Proposition d'améliorations algorithmiques

Nous proposons, pour la suite de ce chapitre, de réviser l'algorithme introduit à la Fig. 5.3, à travers trois modifications présentées ci-dessous.

- Autoriser d'éventuelles occurrences négatives du coefficient de collision nulle $h_{n,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ par l'introduction de la probabilité $\tilde{\mathcal{P}}_{a,\iota}(\mathbf{x})$ proposée à la Sec. 5.2.3.
- Prendre en compte d'éventuelles parois noires (voir Sec. 3.3.3 et 3.4.4) par l'introduction d'un test permettant de savoir si la collision a lieu dans le milieu

\mathcal{V} en \mathbf{x}_j (le test $\mathcal{H}(\mathbf{x}_j \in \mathcal{V})$ doit alors être validé) ou à la paroi en $\mathbf{x}_{w,j}$ ¹ (si le test $\mathcal{H}(\mathbf{x}_j \notin \mathcal{V})$ est validé).

- Implémenter une procédure d'*energy-partitioning* (voir Sec. 3.4.2 et 4.3.3) dans laquelle le type de collisions est géré de façon déterministe dans un premier temps pour augmenter les taux de convergence. Un seuil arbitraire ζ est également défini pour qu'une fois le terme d'extinction $\xi_j = \prod_{q=1}^{j-1} h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}_q) / \hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x}_q)$ inférieur à ζ , l'algorithme bascule vers une branche où le type de collision est traité par des tests de Bernoulli, ceci dans le but de mettre fin à la récursivité. Si $\zeta = 1$, l'ensemble des collisions seront traitées par un test de Bernoulli et si $\zeta = 0$ celles-ci seront traitées de façon déterministe. Dans ce cas, seule une collision à une paroi noire pourra mettre fin à la récursivité.

Ces trois modifications étant présentées en détail dans les Chap. 3 et 4, nous ne reviendrons pas ici sur le formalisme mathématique qu'elles impliquent. Toutefois, l'algorithme résultant de cette révision est rigoureusement schématisé à la Fig. 5.4.

5.3 Mise en pratique dans un benchmark et choix des paramètres libres

Dans la section précédente, nous avons donc proposé une approche originale qui permet une description statistique des coefficients d'absorption directement au sein de l'équation du transfert radiatif. D'un point de vue encore formel, cette proposition semble offrir des perspectives numériques et analytiques intéressantes. Il est donc désormais nécessaire de voir comment cette approche se traduit en pratique, une fois implémentée.

Toutefois, dans un premier temps, il est nécessaire de définir un nombre important de grandeurs arbitraires. Certaines d'entre-elles ont déjà été définies au cours des paragraphes précédents :

- La densité de probabilité des libres parcours a été définie comme $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l'_j \mathbf{u}_0) dl'_j\right)$ (telle qu'elle est définie pour les algorithmes à collisions nulles standards).
- La probabilité d'absorption a elle aussi été définie, dans le but d'autoriser d'éventuelles occurrences négatives du coefficient de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$:

$$\tilde{\mathcal{P}}_{a,i}(\mathbf{x}) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) + |h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})|}$$
- Le coefficient d'extinction $\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x})$ arbitraire pour une transition donnée a également été posé comme égal $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x})$.

Nous ne reviendrons pas ici sur ces trois propositions arbitraires. Néanmoins, plusieurs paramètres libres restent encore à être définis, c'est le cas :

1. Le point $\mathbf{x}_{w,j}$ correspond à la première intersection entre la paroi \mathcal{B} et la demi-droite définie par le point \mathbf{x}_{j-1} et la direction $-\mathbf{u}_0$.

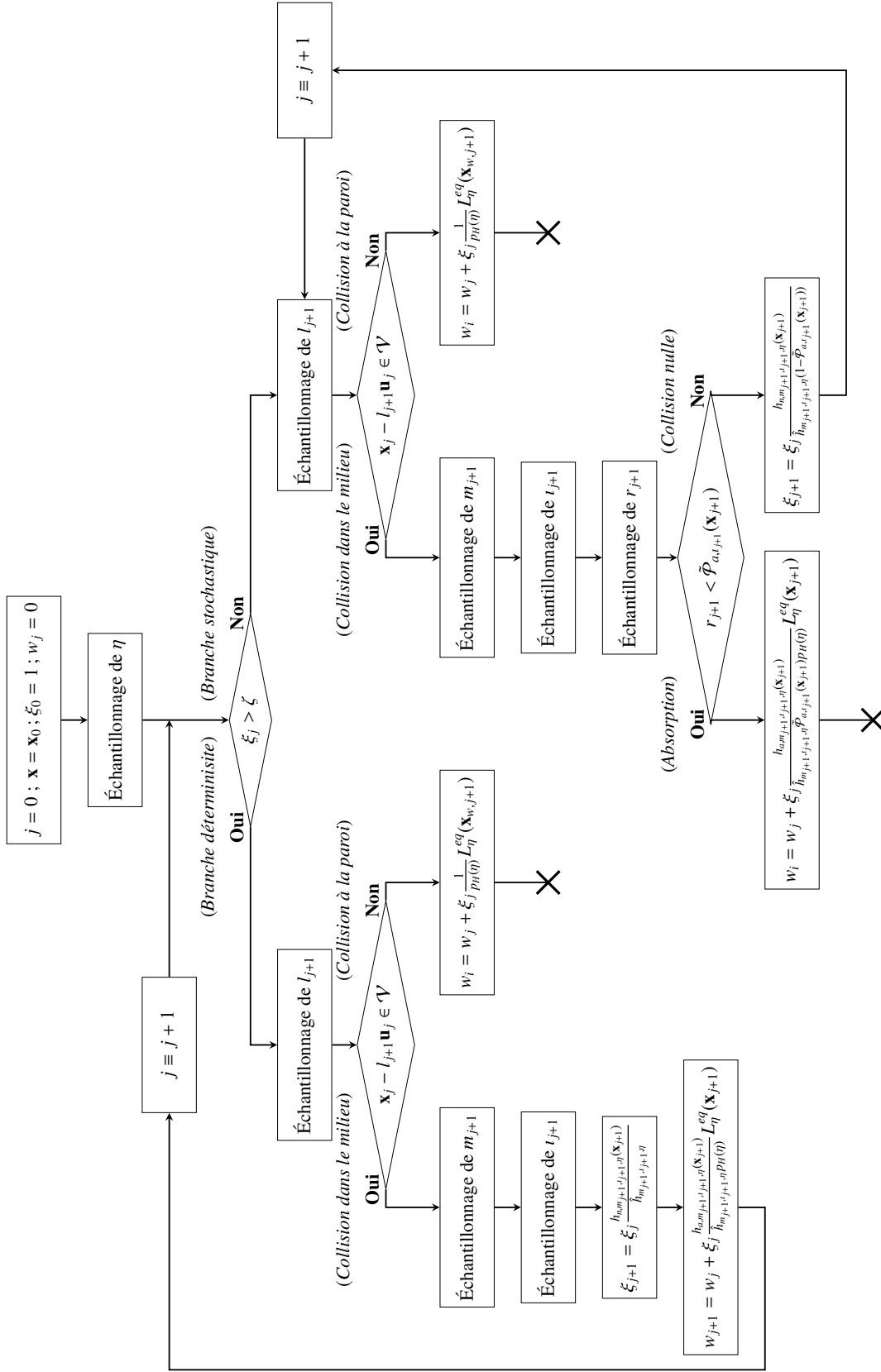


FIGURE 5.4 – Algorithme à collisions nulles avec échantillonnage des transitions permettant d'estimer la luminance $L_{\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0}$ au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 au sein d'un milieu gazeux non-diffusant entouré par des parois noires. Cet algorithme est constitué d'une branche où les collisions sont traitées de façon déterministe (procédure d'*energy-paritioning*, voir [Sec. 3.4.2](#) et [4.3.3](#)) qui permute vers une branche où elles sont traitées de façon stochastique par un test de Bernoulli. Enfin, cet algorithme permet de traiter des coefficients négatifs de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) < 0$ sans créer de biais.

- du champ d'extinction arbitraire $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$;
- de la densité de probabilité des nombres d'onde $p_H(\eta)$;
- de la probabilité $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ associée à chaque espèce moléculaire ;
- de la probabilité $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ associée à chaque transition i pour une espèce moléculaire m donnée ;
- du seuil ζ à partir duquel l'algorithme dans lequel les collisions sont traitées par *energy-partitioning* permute à une branche où elles sont traitées par un test de Bernouilli.

Ces choix ne sont pas anodins dans la mesure où ils vont conditionner le comportement et le taux de convergence de l'algorithme présenté à la Fig. 5.4. Il s'agira en particulier de s'assurer, autant que possible, que le coefficient $\hat{h}_{m,i,\eta}(\mathbf{x}) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x})\mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ soit supérieur à $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$, pour tout nombre d'onde, toute espèce moléculaire, toute transition et toute position, afin d'éviter une définition de coefficients négatifs de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ qui, comme nous l'avons vu au Chap. 4, sont susceptibles d'induire une importante augmentation de la variance.

Pour attester de la faisabilité de l'approche proposée et pour définir ces choix de paramètres libres, nous nous sommes appuyés sur un benchmark proposé par F. André et R. Vaillon dans l'article [André et Vaillon, 2010]. Un important travail a été fait pour parvenir à des choix de paramètres assurant une bonne convergence dans chacun des cas d'intérêt (voir Sec. 5.3.3). Cette démarche, relevant plus de l'essai-erreur, que d'une réelle optimisation basée sur la physique du transfert radiatif et de la spectroscopie moléculaire, s'est appuyée sur une approche par variance nulle dont les résultats seront présentés à la Sec. 5.3.2.

Nous pensons que les propositions faites ici permettent de traiter de façon sûre des cas d'études proches de ceux rassemblés dans le benchmark d'intérêt, mais qu'elles ne constituent certainement pas des choix optimaux. Notre motivation n'était pas d'arriver à des paramètres arbitraires idéalement choisis ou à un algorithme particulièrement performant, mais de montrer la faisabilité pratique de l'approche faisant l'objet de ce chapitre. Les résultats obtenus sont présentés à la Sec. 5.3.4.

5.3.1 Présentation des six configurations d'étude

Le benchmark considéré ici, tiré de [André et Vaillon, 2010], est composé de six configurations d'étude couvrant une grande variété de problématiques rencontrées en combustion (de la chambre de combustion à la signature infrarouge de panaches chauds).

Ces six cas d'étude consistent à estimer la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ émise par une colonne finie de milieu gazeux non-diffusant définie de 0 à \mathbf{x}_0 ². Seules les dimensions de la colonne de gaz et les champs de propriétés (température, compositions moléculaires)

2. Cela consiste d'un point de vue algorithmique à considérer une paroi noire absorbante de température $T=0\text{K}$ en $\mathbf{x} = 0$.

les distinguent. Leurs propriétés respectives sont schématisées à la Fig. 5.5. Dans chacun de ces six cas, la pression considérée est définie comme égale à la pression atmosphérique.

Les deux premiers cas, respectivement notés C1 et C2 sont tirés de l'article [Soufiani *et al.*, 1985]. La colonne de gaz est composée d'une zone chaude et d'une zone froide, chacune homogène et isotherme, de dimensions et de températures respectives $10\text{cm} / T = 1500\text{K}$ et $1\text{m} / 500\text{K}$. Dans le cas C1, le mélange de gaz est composé de CO_2 à 50% dans la zone chaude et à 5% dans la zone froide. Pour le cas C2, ces fractions molaires sont conservées, mais l'espèce participante est de la vapeur d'eau.

Les cas C3, C4 et C5 sont quant à eux inspirés de l'article [Liu *et al.*, 2001]. La dimension de la colonne est de 8m , le profil de température est linéaire par morceaux : croissant de 400K à 2400K entre 0m et 1.5m puis décroissant de 2400K à 800K de 1.5m à 8m . Le cas C3 est composé d'un mélange de 20% de CO_2 et de 10% de H_2O . Dans le cas C4, seul le CO_2 est pris en compte (avec une fraction molaire de 20%) et dans le cas C5, seule la vapeur d'eau est représentée (avec une fraction molaire de 10%).

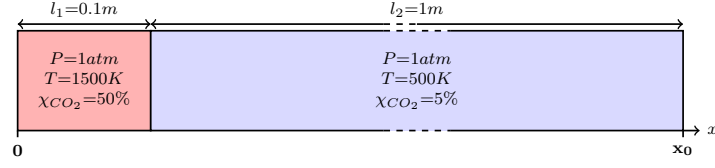
Enfin, le cas C6, tiré de la publication [Rivière *et al.*, 1992], est constitué d'une zone chaude de 40cm dont la température et les fractions molaires d' H_2O sont uniformes par morceaux (voir Fig. 5.5) ainsi que d'une zone froide de 200m séparant le point d'observation et la zone chaude. Ce dernier cas d'étude constitue généralement une configuration très difficile à prendre en compte (ces difficultés sont en particulier rencontrées lors d'utilisation de modèles spectraux simplifiés de types k-corrélés).

Le fait que les hétérogénéités de ces six cas d'étude soient suffisamment simples pour que l'on puisse calculer analytiquement les épaisseurs optiques, ne limite en rien l'étude de faisabilité présentée ici. Il ne s'agit pas d'utiliser les algorithmes à collisions nulles pour tester leur comportement vis-à-vis des hétérogénéités (cela a été fait au Chap. 4), mais pour étudier ce qu'implique d'un point de vue numérique l'échantillonnage des transitions moléculaires.

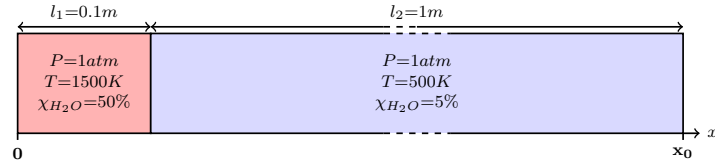
5.3.2 Approche par variance nulle afin d'orienter le choix des probabilités

Comme précisé en introduction de cette section, plusieurs grandeurs arbitraires doivent encore être déterminées. C'est en particulier le cas de trois probabilités : la densité de probabilité des nombres d'onde $p_H(\eta)$, la probabilité $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ associée à chaque espèce moléculaire et la probabilité $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ associée à chaque transition i pour une espèce moléculaire m donnée.

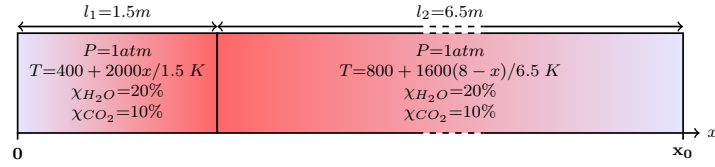
Pour orienter ces choix, nous avons recouru à une approche par variance nulle (voir Sec. 3.3.4.2), en partant de l'Eq. 5.18 dans laquelle nous avons libéré les choix de toutes les probabilités et densités de probabilité (à savoir $p_H(\eta)$, $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j)$, $\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)$,



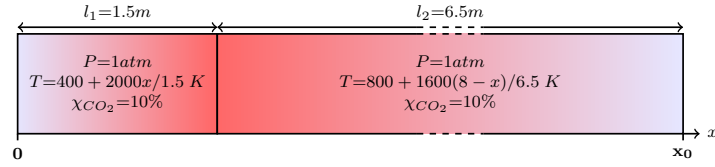
(A) Cas d'étude C1



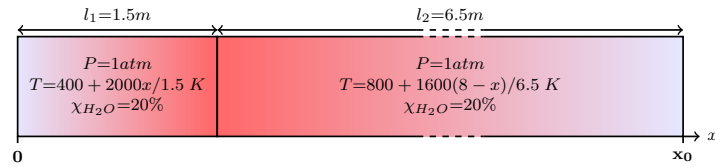
(B) Cas d'étude C2



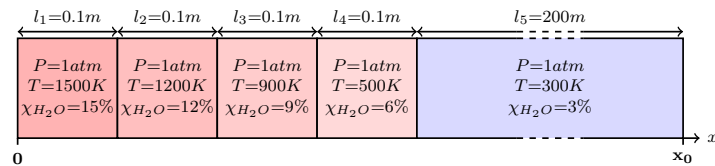
(C) Cas d'étude C3



(D) Cas d'étude C4



(E) Cas d'étude C5



(F) Cas d'étude C6

FIGURE 5.5 – Benchmark proposé dans l'article [André et Vaillon, 2010]. Les dimensions, ainsi que les pressions, températures et fractions molaires des différentes espèces participantes y sont représentées.

$\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)$ et $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)$), dans le but de déterminer leur expression respective (indiquée \emptyset) assurant une variance nulle du poids de Monte-Carlo. Les résultats obtenus par cette approche (décrite à l'Annexe C) sont présentés ci-après :

Nombres d'onde. La densité de probabilité des nombres d'onde assurant une variance nulle du poids de Monte-Carlo est donnée par le rapport entre la luminance monochromatique au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 et la luminance au même point, dans la même direction mais intégrée spectralement entre η_{\min} et η_{\max} :

$$p_{H,\emptyset}(\eta) = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{\int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) d\eta} \quad (5.26)$$

Nous rechercherons donc à approcher au mieux $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ par un modèle simplifié de luminance, analytiquement intégrable entre η_{\min} et η_{\max} pour pouvoir assurer une inversion de la fonction de répartition et donc un échantillonnage des nombres d'onde.

Libres parcours. La densité de probabilité des libres parcours assurant une variance nulle est donnée par :

$$p_{\mathcal{L}_j,\emptyset}(l_j) = \frac{\exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l'_j \mathbf{u}_0) dl_j\right) [k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0)]}{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} \quad (5.27)$$

On remarque alors que la densité de probabilité

$$\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l'_j \mathbf{u}_0) dl_j\right) \quad (5.28)$$

que l'on a choisi de conserver, correspond à la densité de probabilité idéale $p_{\mathcal{L}_j,\emptyset}(l_j)$ pour le cas particulier d'un milieu à l'équilibre thermodynamique ($L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) = L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$). En d'autres termes, la variance associée à la variable aléatoire des libres parcours, sera faible si le milieu est proche d'un équilibre thermodynamique et plus importante s'il en est éloigné.

Espèces moléculaires. La probabilité associée à chaque espèce moléculaire m garantissant une variance nulle du poids de Monte-Carlo est donnée par le rapport entre la participation $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ de l'ensemble des raies de l'espèce m et le coefficient d'absorption :

$$\mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = \frac{\sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)} = \frac{\sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)} \quad (5.29)$$

Il faudra donc chercher à modéliser, en fonction de la position \mathbf{x} et de la position η , la fraction du coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ due à la molécule m .

Transitions moléculaires. La probabilité associée à chaque transition i d'une espèce m assurant une variance nulle est donnée par le rapport entre la participation de cette transition au coefficient d'absorption et la participation de l'ensemble des raies de l'espèce m à ce même coefficient d'absorption :

$$\mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\sum_{i=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)} \quad (5.30)$$

Pour un gaz mono-moléculaire, nous chercherons donc à modéliser le rapport entre la participation d'une raie et le coefficient d'absorption global pour tout point \mathbf{x} du milieu et tout nombre d'onde η . Cette étape constitue certainement l'élément le plus délicat du choix des paramètres libres.

Type de collision. Enfin, la probabilité d'absorption assurant une variance nulle du poids de Monte-Carlo est donnée par :

$$\mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_j) + k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)L_{\eta}(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0)} \quad (5.31)$$

S'il était possible d'utiliser ces probabilités idéales, une seule réalisation de l'algorithme de Monte-Carlo serait nécessaire pour estimer $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ avec une variance nulle, quelle que soit la valeur du champ de $\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x})$. Celui-ci n'aurait alors qu'une incidence sur le temps de calcul en conditionnant uniquement l'indice j de la collision à laquelle a lieu une absorption. Si l'on souhaitait minimiser ce temps de calcul, c'est-à-dire faire en sorte que l'absorption ait lieu toujours à la première collision, il faudrait alors que la probabilité $\mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$ soit égale à 1, ce qui reviendrait à fixer $\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x}) = k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ pour tout \mathbf{x} .

Ces conclusions nous réconfortent également quant au choix fait pour le coefficient d'extinction $\hat{h}_{\eta}(\mathbf{x}_j) = \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x}_j)$ associé à une transition particulière. En effet, si l'on considère les probabilités optimales assurant une variance nulle, cette égalité équivaut à $\hat{h}_{\eta}(\mathbf{x}_j) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x}_j)$. Et si l'on suppose que l'on parvienne à éviter toute collision nulle (si $\hat{k}_{\eta}(\mathbf{x}_j) = k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)$), nous arrivons alors à l'égalité $\hat{h}_{\eta}(\mathbf{x}_j) = h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)$.

Cette approche par variance nulle a été réalisée ici pour un milieu gazeux infini et non-diffusant. Toutefois la même approche peut être effectuée pour un milieu fini et/ou diffusant. Il est juste important de remarquer, pour les sections suivantes, que l'ajout d'une frontière n'entraîne aucune modification des probabilités idéales relatives aux indices d'espèce moléculaire $\mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$, de transition $\mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$ et au type de collision $\mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$, dans la mesure où ces trois probabilités n'interviennent que dans le cas où la collision a lieu dans le milieu participant.

5.3.3 Choix des paramètres libres

Cette section a pour objectif d'introduire les choix faits pour les derniers paramètres libres : le champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$, la densité de probabilité des nombres d'onde $p_H(\eta)$, la probabilité $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ associée à chaque espèce moléculaire, la probabilité $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ associée à chaque transition i pour une espèce moléculaire m donnée, ainsi que le critère ζ à partir duquel l'algorithme permute d'un traitement déterministe des collisions (*energy-partitioning*) à un traitement stochastique par test de Bernoulli. Ces différents termes arbitraires n'ont une incidence que sur les taux de convergence de la méthode proposée et n'influent en rien sur le caractère de solution de référence de l'algorithme présenté à la Fig. 5.4.

Les propositions faites ici résultent d'un travail d'optimisation qui a consisté à affiner petit à petit les modèles choisis par une approche de type essai-erreur, jusqu'à atteindre un taux de convergence satisfaisant pour chacun des 6 cas d'étude proposés dans [André et Vaillon, 2010]. Les choix proposés ne sont certainement pas optimaux et nous pensons qu'un important travail les concernant sera nécessaire dans la continuité de ces travaux. L'objectif de cette section n'est donc pas de faire des propositions conduisant à un algorithme plus rapide ou plus performant qu'un autre, mais de prouver la faisabilité pratique, dans des temps de calcul acceptables, de l'approche présentée dans ce chapitre.

La principale difficulté concerne très probablement la définition des champs de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ ainsi que des probabilités $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$. En effet, comme mis en évidence à la Sec. 5.2.3, il est souhaitable de définir ces trois paramètres libres de sorte à garantir l'inégalité

$$\hat{k}_\eta(\mathbf{x})\mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_i(\mathbf{x}) > h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}) \quad (5.32)$$

pour éviter d'éventuels problèmes d'augmentation brutale de la variance (tels que ceux présentés au Chap. 4) qui seraient causés par des coefficients $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ négatifs. Ces choix sont donc très critiques en termes de convergence. Trois leviers d'optimisation : $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$, $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ sont alors offerts pour que l'Eq. 5.32 soit vérifiée pour tout nombre d'onde, toute espèce moléculaire, toute transition et en tout point (*i.e.* pour toute température, pression et composition chimique).

Nous avons alors choisi de procéder de la façon suivante :

- nous définissons le champ $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ comme le produit d'un facteur α constant et d'un champ arbitraire $\tilde{k}_\eta(\mathbf{x})$ majorant idéalement pour tout η et tout \mathbf{x} le champ du coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$:

$$\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) = \alpha \tilde{k}_\eta(\mathbf{x}) \quad (5.33)$$

- nous nous concentrons sur le choix des probabilités arbitraires $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$;
- nous ajustons la constante α de sorte à vérifier dans la quasi-totalité des cas l'Eq. 5.32. La valeur du paramètre α sera donc conditionnée par la qualité du choix des probabilités $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$. Si celles-ci respectaient les conclusions de l'approche par variance nulle alors un facteur $\alpha = 1$ serait suffisant, mais si

ces probabilités sont sous-estimées localement (pour un nombre d'onde et une transition donnés), la valeur de α devra être augmentée en conséquence.

Choix du champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$. En s'appuyant sur les conclusions de l'approche par variance nulle (voir [Sec. 5.3.2](#)), le champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) = \alpha \tilde{k}_\eta(\mathbf{x})$ doit être le plus proche possible du champ de coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$. La constante α ne jouant un rôle que de facteur correctif permettant d'assurer la condition de l'[Eq. 5.32](#) quelle que soit la qualité des probabilité $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$, nous nous concentrons donc ici sur le champ de $\tilde{k}_\eta(\mathbf{x})$.

Dans un premier temps nous avons défini le champ de $\tilde{k}_\eta(\mathbf{x})$ comme uniforme et indépendant des nombres d'onde. Le paramètre α a été augmenté progressivement dans chacun des six cas d'étude, jusqu'à ce qu'aucun coefficient négatif de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ ne soit rencontré pendant le calcul de luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ intégrée entre $\eta_{\min} = 10 \text{ cm}^{-1}$ et $\eta_{\max} = 15000 \text{ cm}^{-1}$. Les temps de calcul, assurant une erreur relative de 1%, obtenus suite à ce premier modèle de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$, sont compris entre 1mn pour le cas C1 à 5h30 pour le cas C6³.

Pour comprendre pourquoi ces temps sont si importants et différents, il est nécessaire d'analyser la dépendance spatiale et spectrale du coefficient d'absorption (voir [Fig. 5.6](#), où trois spectres d'absorption produits pour 3 points du cas d'étude C3 sont représentés). En définissant $\tilde{k}_\eta(\mathbf{x})$ comme une constante majorant en tout

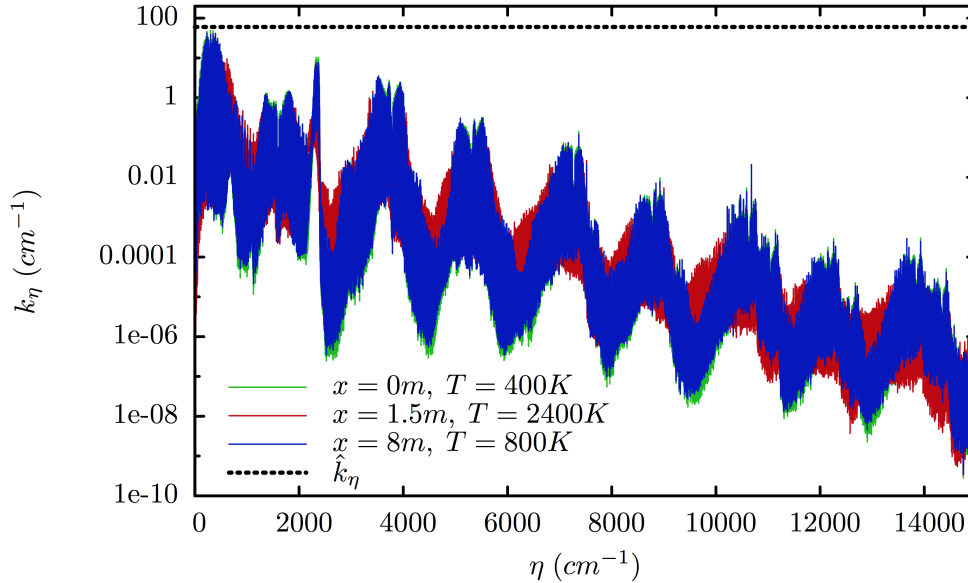


FIGURE 5.6 – Spectres d'absorption produits pour les conditions thermodynamiques et la composition chimique rencontrées en 3 points ($x=0\text{m}$, $x=1.5\text{m}$ et $x=8\text{m}$) du cas d'étude C3. Le coefficient d'extinction $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ défini comme une constante majorant le coefficient d'absorption maximal est également représenté.

3. Les calculs ont été réalisés sur un seul cœur d'un processeur Intel Core i7 de 2.8GHz. Les temps de calcul excluent les étapes de preprocessing et de chargement des données.

point et pour tout nombre d'onde le coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$, on constate qu'excepté pour les nombres d'onde où le coefficient d'absorption est très important, $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ majore très largement (jusqu'à un facteur 10^{11}) le coefficient d'absorption. Cela se traduit algorithmiquement par une proportion de collisions nulles très conséquente. Puisque ces collisions nulles n'ont que peu d'effet sur la convergence de l'algorithme, et ne permettent pas de mettre fin à la récursivité d'une réalisation (voir Fig. 5.4), cela explique les temps de calcul importants, d'autant plus si les dimensions caractéristiques sont grandes.

On mesure alors les importantes marges d'amélioration qui peuvent être réalisées en détaillant de façon plus rigoureuse le champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$. Nous avons alors fait appel à des spectres d'absorption haute-résolution. Le point important ici, est que ces spectres n'ont pas besoin d'être en cohérence avec les données spectroscopiques ou avec les hypothèses spectrales faites pour la simulation d'intérêt. Ces spectres doivent simplement permettre de vérifier l'Eq. 5.32 tout en minimisant autant que possible la quantité de collisions nulles rencontrées. Idéalement, ils doivent être choisis de sorte à majorer légèrement les champs de coefficients d'absorption réels pour tout nombre d'onde. Si tel n'est pas le cas, une augmentation du facteur α permettra de corriger cette mauvaise estimation. Il est important de rappeler que, dans la mesure où le champ de \hat{k}_η est arbitraire, les choix faits ici n'influent en rien sur le caractère exact de la méthode de Monte-Carlo, il n'a pour seul but que d'accélérer les temps de calcul.

Dans l'objectif d'approcher au mieux la dépendance spatiale et spectrale du coefficient d'absorption, nous avons divisé les milieux d'étude en plusieurs sous-domaines (de 2 à 5 sous-domaines selon le cas d'étude) pour tenir compte de l'hétérogénéité des propriétés du milieu. À chaque sous-domaine a été affecté un spectre d'absorption approximativement représentatif des conditions thermodynamiques et chimiques rencontrées. Nous avons ici utilisé des spectres produits dans d'autres contextes à partir des bases de données spectroscopiques CDSD-1000 pour le CO_2 et Hitemp pour l' H_2O . Les raies les plus intenses (dont l'intensité était supérieure à $10^{-21} \text{ molec.cm}$) de CDSD-4000 et de HITEMP 2010 ont également été rajoutées à ces spectres pour que l'Eq. 5.32 soit vérifiée dans les plages spectrales les plus critiques. Ces mêmes spectres ont été conservés pendant toute la durée de ces travaux, quelles que soient les bases de données spectroscopiques ou les hypothèses spectrales retenues (troncature d'ailes de raies, profils de raie, *etc.*) pour le calcul de $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Ce nouveau choix de champ de \hat{k}_η a alors conduit à une accélération des temps de calcul de 60 à 20 000 fois selon le cas d'étude par rapport à un champ de \hat{k}_η uniforme. En effet, en perfectionnant ce choix, une quantité très importante de collisions nulles ont pu être ainsi évitées. Les résultats obtenus grâce à cette proposition sont décrits à la Sec. 5.3.4.

Toutefois, n'importe quel champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ validant autant que possible l'Eq. 5.32 peut être accepté sans altérer le caractère de référence de la méthode, seul le taux de convergence de l'algorithme en sera modifié. Il est par exemple possible d'imaginer des solutions intermédiaires. Il pourrait notamment être possible de créer une banque de données de spectres approchés, de faible résolution spectrale, majorant les spectres réels d'absorption pour une large plage de conditions thermodynamiques. Les temps

de calcul seraient alors certainement plus importants que ceux obtenus avec le choix présenté précédemment, mais le travail de définition des champs de \hat{k}_η en serait grandement simplifié.

Choix de la probabilité des transitions. Les résultats de l'approche par variance nulle énoncent que la probabilité idéale associée à chaque transition est définie comme le rapport entre la participation d'absorption $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ de la transition i et la somme des participations de toutes les transitions d'une molécule m donnée. Si l'on considère un gaz mono-moléculaire, cette probabilité idéale est définie comme le rapport entre $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ et le coefficient d'absorption. Bien entendu, cette proposition ne peut être retenue dans l'approche proposée ici, puisqu'il serait nécessaire d'évaluer le coefficient d'absorption à chaque collision (et donc de sommer, à chaque collision, les contributions de l'ensemble considérable de transitions, de façon déterministe).

Ce choix de probabilités est probablement le plus critique et le plus complexe à mettre en œuvre. En effet, il n'est pas imaginable de produire à chaque réalisation (et encore moins à chaque collision) un jeu complet de probabilités associées à chacune des transitions représentées dans la base de données spectroscopique d'intérêt. Les temps de calcul que cela impliquerait seraient trop importants. Or, toujours en se basant sur l'approche par variance nulle, il faudrait idéalement que ces jeux de probabilités soient définis en tout point du milieu et pour tout nombre d'onde. Cela n'est concrètement pas imaginable, même en négligeant les variations dues aux hétérogénéités des propriétés du milieu (température, pression et concentrations), cela signifierait créer autant de spectres de \mathcal{P}_i qu'il y a de transitions dans les bases de données spectroscopiques.

Notre première proposition de \mathcal{P}_i a alors consisté à imaginer un modèle très simplifié dans lequel les profils de toutes les raies $f(\eta)$ sont identiques, et où ces dernières sont centrées en un même nombre d'onde η_0 . En appliquant les résultats de l'approche par variance nulle pour ce modèle simplifié, on arrive à la proposition suivante :

$$\mathcal{P}_i(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{P}_{m,i,\eta}(\mathbf{x}) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})}{\sum_{i'=1}^{N_i(m)} h_{a,m,i',\eta}(\mathbf{x})} = \frac{S_{m,i}(\mathbf{x})f(\eta)}{\sum_{i'=1}^{N_i(m)} S_{m,i'}(\mathbf{x})f(\eta)} = \frac{S_{m,i}(\mathbf{x})}{\sum_{i'=1}^{N_i(m)} S_{m,i'}(\mathbf{x})} \quad (5.34)$$

Les profils de raies étant identiques, cette probabilité est alors définie comme le ratio entre l'intensité $S_{m,i}$ de la raie i divisée par la somme des intensités de l'ensemble des raies de la molécule m . L'avantage de cette proposition réside dans le fait que les intensités de raies ne dépendent pas du nombre d'onde d'intérêt. En milieu homogène, ce cas d'étude est donc tout à fait envisageable d'un point de vue numérique. En effet, puisque $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ ne dépend plus du nombre d'onde, seul un jeu de probabilités (pour toutes les transitions de l'espèce m) est à précalculer. Pour un milieu hétérogène, on peut imaginer le discrétiser suffisamment pour couvrir de façon approximative les hétérogénéités des propriétés et produire autant de jeux de $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ qu'il y a de mailles. Cette proposition a donné des résultats et des temps de calcul acceptables dans le cas particulier où les domaines spectraux d'intégration

étaient faibles (de la taille d'une bande étroite) et qu'une troncature des ailes de raie était mise en place. En effet, grâce à la troncature, seules les raies les plus proches de l'intervalle d'intégration sont prises en compte par l'algorithme qui les échantillonne alors uniquement selon leurs intensités respectives. Toutefois, dès que l'on supprime cette troncature où que l'on élargit le domaine d'intégration, les temps de calcul deviennent rapidement excessifs. Avec cette proposition, une raie très intense mais très éloignée du nombre d'onde d'étude η a une plus grande probabilité d'être échantillonnée qu'une raie plus faible mais centrée en η , même si son coefficient $h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ en η est de loin supérieur à celui de la première raie.

Il est alors évident, qu'à cause de son indépendance spectrale, cette première proposition pose de sérieuses limitations. Toutefois, comme nous venons de le dire, il est difficilement imaginable de produire des jeux de $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ couvrant les variations spectrales du coefficient d'absorption. La seule solution, pour prendre en compte l'effet dû à l'éloignement spectral des raies du nombre d'onde d'étude, consiste alors à proposer une probabilité permettant d'être calculée analytiquement au cours du calcul sans avoir à produire un jeu complet de $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ pour toutes les transitions à chaque collision.

Nous avons alors retenu la proposition suivante pour prendre en compte cette dimension spectrale dans l'échantillonnage des transitions :

- Nous définissons $[\eta_{db,min}, \eta_{db,max}]$ comme l'intervalle englobant l'ensemble des nombres d'onde de centre de raie contenus dans la base de données spectroscopique d'intérêt. Puis, nous segmentons cet intervalle en bandes régulières (indiquées β) de largeur $\delta_\eta = 0.3cm^{-1}$ et de bornes $[\eta_{min,\beta}, \eta_{max,\beta}]$;
- Nous décomposons la probabilité \mathcal{P}_i associée à chaque transition en un produit de deux probabilités : $\mathcal{P}_i = \mathcal{P}_\beta \times \mathcal{P}_{i,\beta}$
- Dans un souhait de représenter également les variations spatiales des propriétés radiatives, nous conservons les sous-domaines utilisés pour la définition du champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$. Une valeur moyenne de température est alors affectée à chacun de ces sous-domaines.
- La première probabilité $\mathcal{P}_\beta \equiv \mathcal{P}_{\beta,\eta}(\mathbf{x})$ est associée à chaque bande spectrale β . Elle a pour objectif de rendre compte de l'éloignement d'une raie ι par rapport au nombre d'onde d'intérêt η . Nous la définissons comme :

$$\mathcal{P}_\beta = \frac{\text{atan}\left(\frac{\eta_{max,\beta}(\beta)-\eta}{\gamma_Q}\right) - \text{atan}\left(\frac{\eta_{min,\beta}(\beta)-\eta}{\gamma_Q}\right)}{\text{atan}\left(\frac{\eta_{db,max}-\eta}{\gamma_Q}\right) - \text{atan}\left(\frac{\eta_{db,min}-\eta}{\gamma_Q}\right)} \quad (5.35)$$

où γ_Q est un paramètre libre (fixé ici à $\gamma_Q = 1cm^{-1}$ pour les sous-domaines de température $T < 500K$; à $\gamma_Q = 0.5cm^{-1}$ pour $T \in [500K, 1000K]$; à $\gamma_Q = 0.25cm^{-1}$ pour $T \in [1000K, 1500K]$ et à $\gamma_Q = 0.1cm^{-1}$ pour $T > 1500K$). Avec une telle définition, échantillonner une bande d'indice β revient à échantillonner un nombre d'onde η_β selon un profil lorentzien de demi-largeur à mi-hauteur γ_Q ,

centré sur le nombre d'onde d'intérêt η et de retenir la bande β dans laquelle est inclus η_β .⁴

- La probabilité $\mathcal{P}_{i,\beta} \equiv \mathcal{P}_{i,\beta,m}(\mathbf{x})$ est associée aux transitions i centrées dans une bande β donnée. Elle permet de rendre compte de leur intensité par rapport à celles des autres transitions centrées dans la même bande β . Elle est définie comme :

$$\mathcal{P}_{i,\beta} = \frac{S_{m,i}(\mathbf{x})}{\sum_{i'=1}^{N_i(m,\beta)} S_{m,i'}(\mathbf{x})} \quad (5.36)$$

où $S_{m,i}(\mathbf{x})$ est l'intensité de la raie i centrée dans β à la température du sous-domaine auquel appartient \mathbf{x} et où $N_i(m, \beta)$ correspond au nombre de raies de l'espèce m centrées dans la bande β . La probabilité $\mathcal{P}_{i,\beta}$ peut ainsi être calculée en preprocessing pour chacune des températures moyennes des sous-domaines d'étude, pour chaque intervalle spectral β et pour chacune des transitions i centrées en β . Les temps de calcul, associés à la production d'un jeu complet de probabilités $\mathcal{P}_{i,\beta}$ pour une température donnée, varient entre 1 seconde (pour la base de données spectroscopique HITRAN) et 5mn (pour la base de données CDS 4000). Bien que ces temps soient importants, les jeux de probabilités calculés (pour une base de données et une température) peuvent être stockés pour être réutilisés lors d'autres simulations.

Ces choix de probabilités conduisent alors à privilégier les raies les plus intenses, centrées près du nombre d'onde d'intérêt. La procédure d'échantillonnage (illustrée à la Fig. 5.7) est alors composée de deux étapes :

- l'échantillonnage analytique d'une bande β selon un profil de Lorentz centré en η et de demi-largeur à mi-hauteur γ_Q . La probabilité analytique associée à la bande échantillonnée est calculée (de façon quasi-instantanée) au cours de la simulation.
- l'échantillonnage d'une transition parmi les $N_i(m, \beta)$ transitions centrées dans β . Les probabilités associées à chacune de ces transitions ne dépendant que de la température et de la base de données spectroscopique, elles peuvent donc être précalculées et stockées.

Il n'est donc nullement nécessaire, avec la proposition faite ici, de recalculer à chaque réalisation de l'algorithme de Monte-Carlo ou à chaque collision un jeu complet de probabilités associées à l'ensemble des transitions moléculaires.

Choix de la probabilité des espèces moléculaires. Nous n'avons pas, au cours de ces travaux, cherché à optimiser la probabilité associée aux espèces moléculaires (seul le cas C3 comporte un mélange) et avons alors proposé une probabilité uniforme :

$$\mathcal{P}_m = 1/N_m \quad (5.37)$$

où N_m est le nombre d'espèces moléculaires considérées.

4. Si les ailes de raie sont tronquées à une distance $\delta\eta_{trunc}$, alors $[\eta_{db,min}, \eta_{db,max}]$ est remplacé par $[\eta - \delta\eta_{trunc}, \eta + \delta\eta_{trunc}]$.

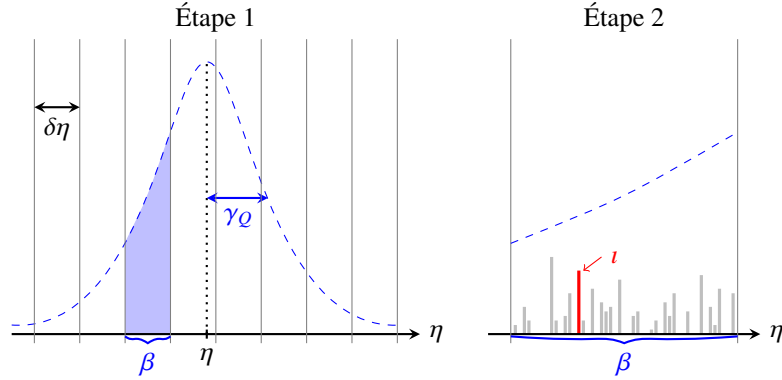


FIGURE 5.7 – Procédure d'échantillonnage des transitions moléculaires. *Étape 1* : une bande β de largeur $\delta\eta$ est déterminée en échantillonnant un nombre d'onde selon un profil de Lorentz, de largeur γ_Q centrée en η . *Étape 2* : Une raie ι est échantillonnée parmi les $N_\iota(\beta)$ raies centrées dans β selon leurs intensités respectives.

Le choix de cette probabilité semble beaucoup moins critique que celui de \mathcal{P}_i . Toutefois, il est assez simplement possible d'imaginer une amélioration de cette probabilité d'espèces moléculaires. L'approche par variance nulle définit la probabilité \mathcal{P}_m idéale comme le rapport entre le coefficient d'absorption dû à l'espèce m et le coefficient d'absorption global (dû à toutes les molécules). Ici encore, il est souhaitable que la probabilité \mathcal{P}_m dépende de la position \mathbf{x} (pour tenir compte des hétérogénéités de composition moléculaire) et du nombre d'onde. On peut donc imaginer un précalcul basé sur des modèles approchés par bandes (*ex* : k-distributions ou modèle de Malkmus) et sur une discrétisation spatiale (telle que celle proposée pour la définition du champ $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$).

Impacts des choix de \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_m sur le facteur correctif α . Comme introduit en début de section, les expressions des probabilités \mathcal{P}_m et \mathcal{P}_i conditionnent la valeur du facteur multiplicatif α . Avec les choix faits précédemment, il a été nécessaire d'ajuster la valeur de α à 50 pour éviter de rencontrer un nombre trop important de coefficients $h_{n,m,\iota,\eta}$ négatifs, susceptibles de provoquer une augmentation importante de la variance de l'estimation. Malgré la valeur très importante de ce facteur multiplicatif, nous rencontrons encore des coefficients de collision nulle négatifs, mais ceux-ci n'ont pas d'impact sensible sur le taux de convergence de l'algorithme.

Fixer le facteur α à 50 équivaut à définir un champ de coefficient d'extinction environ 50 fois plus important que celui du coefficient d'absorption. Aussi, cela se traduit d'un point de vue numérique par une quantité très importante de collisions nulles sans réel intérêt pour le calcul. Cela met donc bien en évidence l'importance du choix des probabilités \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_m qui constituent indéniablement les paramètres libres pour lesquels on peut attendre les améliorations futures les plus significatives. Tout perfectionnement de ces deux probabilités entraînera de facto une réduction de la valeur du facteur correctif α et ainsi des temps de calcul.

L'amélioration du choix de ces paramètres libres constitue alors un enjeu im-

portant et une perspective motivante pour la suite de ces travaux. Nous sommes convaincus qu'elle ne pourra se produire de façon sensible que grâce à une meilleure compréhension et une meilleure modélisation de la physique relative à la spectroscopie moléculaire, qui permettraient d'approcher au mieux les probabilités optimales calculées lors de l'approche par variance nulle. Nous voyons également dans les modèles statistiques de bandes (de type modèle Malkmus) des pistes très intéressantes pour parvenir à ces améliorations.

Choix de la densité de probabilité des nombres d'onde. La densité de probabilité des nombres d'onde $p_H(\eta)$ ne joue un rôle que sur les temps de calcul. Plus elle sera proche de la probabilité assurant une variance nulle : $p_{H,\emptyset}(\eta) = L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)/L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, plus les temps de calcul pour une erreur relative donnée seront faibles.

Dans un premier temps, nous avons défini $p_H(\eta)$ comme uniforme :

$$p_H(\eta) = \frac{1}{\eta_{\max} - \eta_{\min}} \quad (5.38)$$

Cette première proposition, la plus simple qui soit, a conduit à des temps de calcul plutôt satisfaisants quel que soit le cas d'étude considéré. Cependant, nous avons tenté d'améliorer cette procédure d'échantillonnage des nombres d'onde en proposant un modèle approché, inspiré des résultats de l'approche par variance nulle. Il semblait toutefois difficile de définir, pour tout nombre d'onde, un modèle approché de $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ qui puisse être intégré analytiquement entre η_{\min} et η_{\max} pour permettre un échantillonnage des libres parcours. Nous nous sommes donc orientés vers une description par bandes étroites. Nous proposons alors un échantillonnage des nombres d'onde composé de deux étapes :

- Une bande étroite i_b de 25cm^{-1} de largeur est échantillonnée parmi les N_b bandes étroites comprises entre η_{\min} et η_{\max} , selon la probabilité

$$\mathcal{P}_{i_b} = \frac{L_b^m(i_b) + \frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} L_b^m(b)}{2 \sum_{b=1}^{N_b} L_b^m(b)} \quad (5.39)$$

où L_b^m est une luminance intégrée sur la bande i_b précalculée à partir d'un modèle approché de Malkmus, associé à une approximation de Curtis-Godson [Goody *et al.*, 1989]. Un offset : $\frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} L_b^m(b)$ a été rajouté dans cette probabilité (normalisée en conséquence) pour compenser les sous-estimations de certaines bandes par le modèle approché.

- Un nombre d'onde η est échantillonné de façon uniforme sur la bande étroite i_b d'intérêt.

La densité de probabilité des nombres d'onde $p_H(\eta)$ que nous proposons ici est alors donnée par :

$$p_H(\eta) = \frac{L_b^m(i_b) + \frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} L_b^m(b)}{2 \sum_{b=1}^{N_b} L_b^m(b)} \times \frac{1}{\eta_{b,\max} - \eta_{b,\min}} \quad (5.40)$$

où $\eta_{b,\min}$ et $\eta_{b,\max}$ représentent les bornes de la bande étroite i_b . Cette nouvelle proposition a conduit à accélérer de 2 à 5 fois les temps de calcul pour une même erreur relative par rapport à une densité de probabilité uniforme. Cependant, elle reste d'un intérêt limité, dans la mesure où seules les bandes étroites sont pondérées et non les nombres d'onde. Il pourrait alors être peut-être intéressant d'utiliser l'approche proposée par A. Feldick et M. Modest dans [Feldick et Modest, 2011] qui consiste à échantillonner les nombres d'ondes directement à partir des transitions moléculaires.

Choix du seuil ζ . Nous avons fixé la valeur de permutation algorithmique à $\zeta = 0.5$. C'est cette valeur qui a donné les meilleurs résultats en termes de temps de calcul pour une erreur relative donnée. Ce choix est en accord avec l'étude paramétrique réalisée dans le Chap. 4. Toutefois, dans ce même chapitre, on peut noter que la valeur optimale de ζ dépend fortement de l'épaisseur optique. Aussi, si l'on s'éloigne des six cas d'étude présents dans ce benchmark, il pourrait être opportun de repenser le choix de cette valeur. On pourrait également imaginer un algorithme qui adapterait automatiquement la valeur de ζ à partir d'une estimation grossière de l'épaisseur optique.

5.3.4 Résultats obtenus pour les cas d'étude considérés

L'algorithme présenté à la Fig. 5.4 a été appliqué aux six cas d'étude rassemblés dans le benchmark proposé dans [André et Vaillon, 2010] avec les choix de paramètres libres présentés précédemment. Sauf indication contraire, les calculs ont été réalisés en considérant des profils de raie lorentziens et en utilisant une troncature des ailes de raie à une distance de 25cm^{-1} de leur nombre d'onde central.

Les Fig. 5.8, 5.9 et 5.10 ont pour but d'illustrer le type de résultats que l'on peut attendre de l'approche présentée dans ce chapitre. Il devient ainsi possible de modifier les hypothèses spectrales (troncature de raies, profil des raies, *etc.*) ou les données spectroscopiques à partir desquelles est décrit le coefficient d'absorption (bases de données, intensité en dessous de laquelle on néglige les raies, *etc.*) et de constater les effets de ces modifications sur une observable radiative sans avoir à produire de nouveaux spectres de haute-résolution en cohérence avec ces modifications.

Ces figures illustrent, pour le cas C2, les luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennes pour plusieurs bandes étroites de 25cm^{-1} (définies de 1175 à 1925cm^{-1}) estimées par l'algorithme introduit à la Fig. 5.4 avec 10^4 réalisations indépendantes. Les intervalles de confiance sont également fournis pour chaque estimation. À titre de validation, un calcul raie-par-raie basé sur des spectres haute-résolution (produits à partir de HITEMP 2010) est également représenté en trait plein sur chacun des trois graphiques. Quelles que soient les hypothèses ou données spectroscopiques considérées, chacune des simulations, dont les résultats sont illustrés par ces trois graphiques, a utilisé strictement le même algorithme et le même jeu de paramètres

libres (en particulier de \hat{k}_η , de \mathcal{P}_i et de $p_H(\eta)$).

La figure Fig. 5.8 rassemble les résultats de simulations lancées à partir de différentes bases de données : Hitemp 2010, Hitemp, Hitran 2008. La figure Fig. 5.9 illustre le fait qu'il est possible de mesurer l'effet des seuils minimums d'intensité (en dessous desquels les raies sont négligées) sans avoir à produire de nouveaux spectres. Elle représente les luminances moyennées par bandes étroites calculées avec différentes valeurs de seuils minimums d'intensité à $1500K$: $0molec.cm$ (toutes les raies sont sélectionnées), $3.10^{-27}molec.cm$, $10^{-22}molec.cm$ et $10^{-21}molec.cm$. Enfin, la Fig. 5.10 souligne le fait qu'il est également possible d'évaluer simplement l'impact qu'ont les paramètres de raies, en l'occurrence la distance à laquelle sont tronquées les ailes de raie (par rapport à leur nombre d'onde central), sur les luminances moyennées par bandes. Les résultats relatifs à plusieurs distances de troncature : ∞cm^{-1} (pas de troncature), $25cm^{-1}$, $5cm^{-1}$ et $0.5cm^{-1}$ y sont représentés.

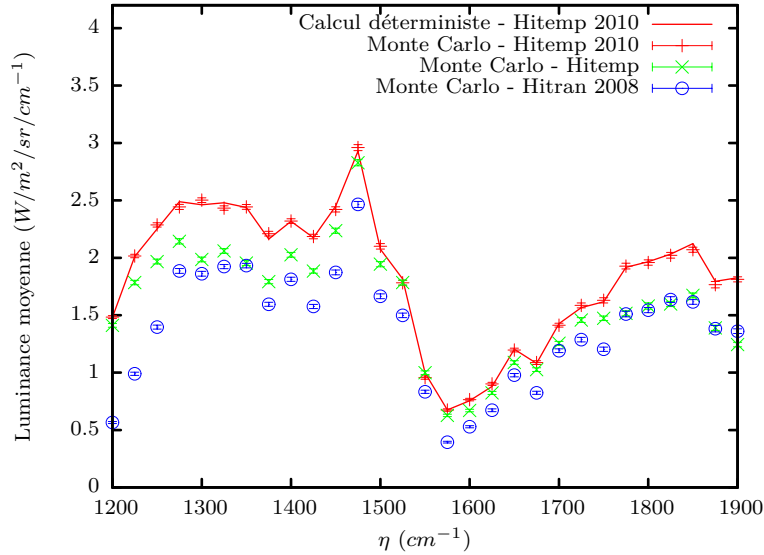


FIGURE 5.8 – Luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennées par bandes étroites pour le cas C2. Ce calcul a été réalisé grâce à l'algorithme de la Fig. 5.4 pour différentes bases de données spectroscopiques : HITEMP 2010, HITEMP et HITRAN 2008. Les résultats sont fournis avec leurs intervalles de confiance. Chaque point a été obtenu avec 10^4 réalisations indépendantes. Un calcul déterministe, réalisé grâce à des spectres d'absorption produits à partir de la base de données HITEMP 2010, est également représenté en trait plein.

Les luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennes représentées dans ces trois graphiques ont été estimées dans des temps de calcul assurant une erreur relative de 1% compris entre 0.1s et 2.4s (avec un processeur Intel Core i7 - 2.8GHz sans parallélisation). La taille de la base de données, le nombre de transitions sélectionnées ou encore le niveau de troncature des raies n'ont que très peu d'influence sur ces temps de calcul (les différences de temps de calcul sont principalement dues à la bande étroite considérée). Ces temps de calcul affichés ne prennent pas en compte les temps de preprocessing ou de chargement des données en mémoire qui peuvent durer de quelques secondes à plusieurs minutes pour les bases de données les plus importantes. Cependant, une

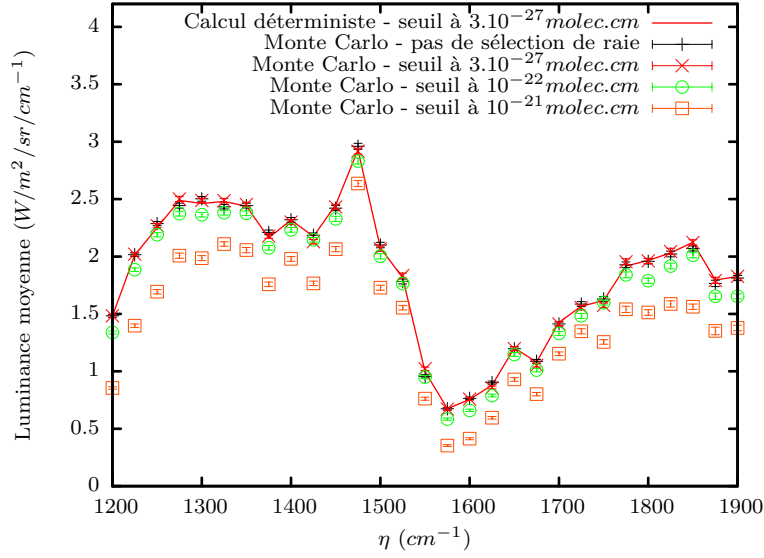


FIGURE 5.9 – Luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennées par bandes étroites pour le cas C2. Ce calcul a été réalisé grâce à l’algorithme de la Fig. 5.4 pour différents seuils minimums d’intensité (en dessous desquels, les raies sont négligées) : 0 molec.cm (toutes les raies sont sélectionnées), $3.10^{-27} \text{ molec.cm}$, $10^{-22} \text{ molec.cm}$ et $10^{-21} \text{ molec.cm}$. Les résultats sont fournis avec leurs intervalles de confiance. Chaque point a été obtenu avec 10^4 réalisations indépendantes. Un calcul déterministe, réalisé grâce à des spectres d’absorption produits à partir de la base de données HITEMP 2010 et un seuil minimum d’intensité de $3.10^{-27} \text{ molec.cm}$ à 1500K , est également représenté en trait plein.

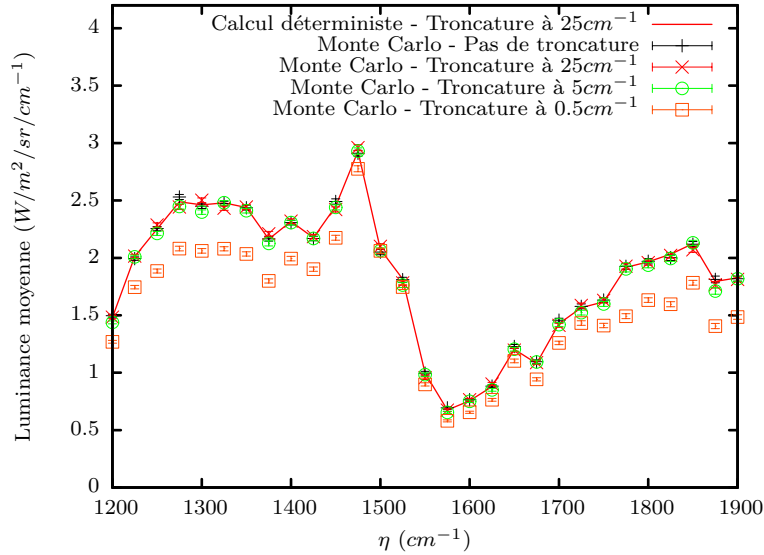


FIGURE 5.10 – Luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennées par bandes étroites pour le cas C2. Ce calcul a été réalisé grâce à l’algorithme de la Fig. 5.4 pour différentes distances de troncature de raie : $\infty \text{ cm}^{-1}$ (pas de troncature), 25 cm^{-1} , 5 cm^{-1} et 0.5 cm^{-1} . Les résultats sont fournis avec leurs intervalles de confiance. Chaque point a été obtenu avec 10^4 réalisations indépendantes. Un calcul déterministe, réalisé grâce à des spectres d’absorption produits à partir de la base de données HITEMP 2010 et une troncature de raie à 25 cm^{-1} , est également représenté en trait plein.

fois que le preprocessing et le chargement des données en mémoire sont effectués, il est possible de lancer autant de simulations différentes que désirées (pour tester différentes hypothèses spectrales ou encore pour évaluer différentes observables radiatives).

La [Tab. 5.1](#), rassemble les luminances $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ intégrées spectralement entre 10cm^{-1} et 15000cm^{-1} calculées à partir de l’algorithme introduit à la [Fig. 5.4](#) et avec les choix des paramètres libres énoncés dans la [Sec. 5.3.3](#). Ces calculs ont été réalisés avec 10^6 réalisations indépendantes, pour chacun des 6 cas d’étude et pour différentes bases de données spectroscopiques. Ces résultats sont fournis avec leur écart-type σ assimilable à un intervalle de confiance, et avec le temps de calcul $t_{1\%}$ requis pour obtenir une erreur relative de 1% (ces temps de calcul excluent ici aussi les étapes de preprocessing et de chargement des données spectroscopiques en mémoire). Les luminances $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ peuvent être comparées à celles obtenues à partir d’un calcul déterministe (notées $L_{hr}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$) basé sur une production de spectres de haute-résolution (voir [Sec. 5.1.1](#)) utilisant les mêmes modèles spectraux et données d’entrée que pour l’algorithme à collisions nulles et aux résultats obtenus avec une approche raie-par-raie par F. André et R. Vaillon dans l’article [[André et Vaillon, 2010](#)] (notés $L_{a,v}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$).

Cas d’étude	Bases de données spectroscopiques	Monte-Carlo (10^6 realisations)			Haute résol.	[André et Vaillon, 2010]
		$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (W/m ² /sr)	σ (W/m ² /sr)	$t_{1\%}$ (s)	$L_{hr}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (W/m ² /sr)	$L_{a,v}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (W/m ² /sr)
C1	CDSD-1000	3125.61	4.42	0.97	3126.06	3105
	CDSD-4000	3146.25	4.53	1.10	3150.32	
C2	HITEMP	3315.11	8.15	1.38	3311.88	4161
	HITEMP 2010	4545.05	9.83	1.11	4558.68	
C3	CDSD-1000 & HITEMP	39223.87	51.56	1.75	39202.5	39331
C4	CDSD-1000	12325.99	16.16	1.26	12320.1	11956
C5	HITEMP	38240.31	49.58	1.27	38215.0	39144
C6	HITEMP	885.93	3.93	9.86	886.55	-
	HITEMP 2010	1066.92	4.30	7.39	1069.81	-

TABLE 5.1 – Luminances intégrées de 10cm^{-1} à 15000cm^{-1} pour les six cas d’étude présentés à la [Sec. 5.3.1](#) et pour différentes bases de données spectroscopiques (CDSD-1000 et CDSD-4000 pour le CO_2 ; HITEMP et HITEMP 2010 pour l’ H_2O). Ces luminances $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ ont été estimées à partir de l’algorithme introduit à la [Fig. 5.4](#) et sont fournies avec leur écart-type σ et le temps de calcul nécessaire à l’obtention d’une erreur relative de 1%. Les luminances $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ peuvent être comparées à celles obtenues à partir d’un calcul déterministe (notées $L_{hr}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$) basé sur une production de spectres de haute-résolution utilisant les mêmes hypothèses et données d’entrée que pour l’algorithme à collisions nulles et aux résultats obtenus avec une approche raie-par-raie par F. André et R. Vaillon dans l’article [[André et Vaillon, 2010](#)] (notés $L_{a,v}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$). Les temps de calcul excluent les étapes de preprocessing et de chargement des données spectroscopiques en mémoire.

Les résultats de l’algorithme proposé dans ce chapitre concordent parfaitement avec les luminances $L_{hr}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ calculées de façon déterministe (pour les mêmes données spectroscopiques et un même modèle de raie). Les différences constatées avec les résultats de [[André et Vaillon, 2010](#)] sont inférieures aux effets mesurés lors du changement de bases de données, soulignant probablement une disparité dans les données spectroscopiques utilisées. Les temps de calcul requis par l’algorithme de Monte-Carlo pour assurer une erreur relative de 1% sont raisonnables dans le positionnement qui est le nôtre. Ils sont compris entre 1s et 8s selon le cas d’étude

(sur un seul cœur d'un processeur Intel Core i7 - 2.8GHz). On constate alors que les temps de calcul relatifs à une intégration de la luminance sur une bande étroite de 25cm^{-1} ou sur tout le domaine infrarouge sont du même ordre de grandeur, ce qui est directement dû au caractère statistique de l'approche proposée. Enfin on notera, que grâce à la nature de la méthode utilisée (algorithme à collisions nulles), les champs de température continus des cas C3, C4 et C5 ont pu être pris en compte sans recourir à la moindre discrétisation volumique des propriétés du milieu (ce qui n'est pas le cas pour le calcul déterministe ou encore dans [André et Vaillon, 2010]).

5.3.5 Coefficients $h_{n,m,i,\eta}$ négatifs et événements rares

Au cours des travaux menés pour proposer des choix satisfaisants de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$, $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ et pour prouver la faisabilité de l'approche faisant l'objet de ce chapitre, la principale difficulté a été d'éviter de rencontrer des plages spectrales et spatiales dans lesquelles les coefficients de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ étaient négatifs. Cependant, même avec les choix proposés à la Sec. 5.3.3 et un facteur correctif α fixé à 50, nous n'avons pas pu assurer en toute généralité $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) > 0$. Nous avons simplement réussi à réduire la quantité de ces événements à un nombre suffisamment faible pour qu'ils ne posent plus de problème d'augmentation brutale de variance telle que rencontrée dans le Chap. 4. En effet, assurer la condition $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) > 0$ équivaut à garantir que le champ arbitraire de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ soit plus grand que $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})/[\mathcal{P}_m(\mathbf{x})\mathcal{P}_i(\mathbf{x})]$ pour tout nombre d'onde η , en tout point \mathbf{x} , pour toute espèce moléculaire m et pour toute transition i . Il est donc très difficile d'assurer de façon exhaustive le caractère majorant du champ de \hat{k}_η .

Pour un champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ fixé, majorant largement le champ du coefficient d'absorption, le non-respect de la condition $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) > 0$ est alors dû à une mauvaise définition des probabilités $\mathcal{P}_m(\mathbf{x})$ et $\mathcal{P}_i(\mathbf{x})$ qui sont localement (pour un nombre d'onde, une position et un nombre d'onde donnés) sous-estimées de façon importante. Or, puisque cinq des six cas d'étude constituant le benchmark sont composés de gaz mono-moléculaires, ces coefficients négatifs de collision nulle sont causés par un choix imparfait de \mathcal{P}_i . Avec les choix faits pour cette probabilité, décomposée comme le produit de \mathcal{P}_β et de $\mathcal{P}_{i,\beta}$ (voir Sec. 5.3.3), nous rencontrons deux principaux types de cas pathologiques (illustrés à la Fig. 5.11) :

- Ceux dus à une sous-estimation de $\mathcal{P}_{i,\beta}$. On les rencontre lorsque la bande spectrale β échantillonnée est celle à laquelle appartient le nombre d'onde η d'intérêt et dans laquelle est centrée une raie très intense (en vert sur la Fig. 5.11a). Si, une raie de plus faible intensité (en rouge sur la Fig. 5.11a) est centrée à une proximité directe du nombre d'onde η , sa contribution $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ en η peut être très importante, mais sa probabilité $\mathcal{P}_{i,\beta}$ est très sous-estimée à cause de la raie très intense présente également dans β .
- Ceux dus à une sous-estimation de \mathcal{P}_i à cause de \mathcal{P}_β . Ces événements sont rencontrés lorsque la bande β échantillonnée est très distante du nombre d'onde η d'intérêt et donc a une probabilité \mathcal{P}_β très faible, mais qu'au sein de cette bande est présente une raie très intense (en rouge sur la Fig. 5.11b) avec une largeur de raie importante. Il est possible que dans cette configuration, ce soit

cette raie qui constitue l'essentiel du coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x})$ global en η , rendant alors la probabilité \mathcal{P}_i largement sous-estimée à cause de la très faible valeur de \mathcal{P}_β associée à β .

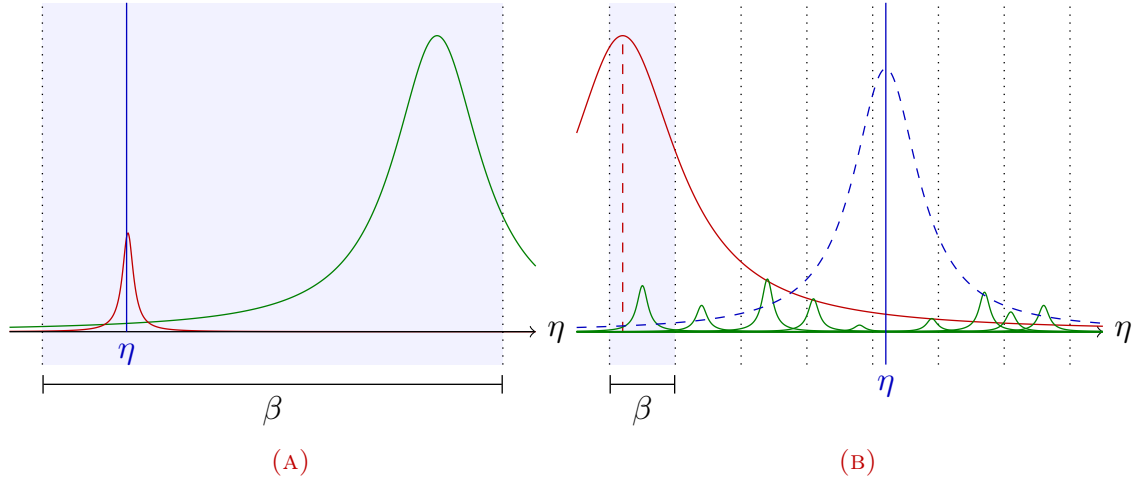


FIGURE 5.11 – Principaux cas dans lesquels la condition $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) > 0$ n'est pas respectée à cause d'une sous-estimation de la probabilité $\mathcal{P}_{i,\beta}$ (voir Fig. (A)) ou d'une sous-estimation de la probabilité \mathcal{P}_β (voir Fig. (B)).

Si ces coefficients négatifs de collision nulle $h_{n,m,i,\eta}$ ont un impact important sur le taux de convergence de l'algorithme, c'est qu'ils entraînent, à cause du caractère récursif de l'algorithme, une augmentation importante de la valeur absolue du poids de Monte-Carlo. Cette augmentation est d'autant plus grande qu'il y a, au cours d'une même réalisation indépendante, plusieurs collisions caractérisées par $h_{n,m,i,\eta} < 0$ (voir Sec. 5.2.3). Les réalisations, pour lesquelles un nombre très important de coefficients négatifs de collision nulle est rencontré, se comportent alors statistiquement comme des événements rares (voir Sec. 3.2.3.2) : ces réalisations ont de très faibles probabilités d'occurrence, mais des poids de Monte-Carlo très importants, conduisant à une augmentation importante de l'écart-type de l'estimation de la grandeur d'intérêt. Bien que problématiques, ces événements particuliers doivent être échantillonnés pour que la statistique du problème soit bien prise en compte par l'algorithme de Monte-Carlo. Dans le cas contraire, les résultats produits par ce type d'algorithme peuvent être biaisés.

De tels événements rares sont couramment rencontrés lorsque l'on explore de nouvelles approches statistiques, s'éloignant des pratiques habituelles. Il y a toujours un risque que la statistique soit telle que des événements rares ne soient pas échantillonnés (ici une succession de collisions caractérisées par $h_{n,m,i,\eta} < 0$) et induisent une mauvaise évaluation de l'écart-type associé à l'estimation de la grandeur d'intérêt. Typiquement, un intervalle de confiance peut indiquer que les résultats sont précis à 1%, alors qu'à cause d'événements rares qui n'ont pas été échantillonnés, l'estimation d'une observable radiative est différente à plus de 10%

de la valeur de la solution exacte.

Au cours des travaux présentés dans ce chapitre, nous avons rencontré de telles évaluations erronées. Pour nous assurer de la validité statistique des résultats, la première étape a été de les comparer à ceux obtenus par un calcul déterministe. Puis, nous avons augmenté le nombre de réalisations pour chacune des six simulations afin d'augmenter le nombre d'éventuels événements rares. Nous pouvons alors vérifier, que malgré cette augmentation du nombre d'échantillons, les calculs convergent bien et l'écart-type associé aux estimations évolue bien comme l'inverse de la racine carré du nombre de réalisations. Pour accroître notre confiance dans les écarts-types estimés, nous avons systématiquement calculé la variance de la variance de ces estimations (voir [Sec. 3.2.3.2](#)) et avons vérifié que cette dernière était toujours inférieure à 0.1 (comme conseillé dans [X-5 Monte Carlo Team, 2008]). Dans le cas présent, la variance de la variance est toujours inférieure à 0.005, quel que soit le cas d'étude du Benchmark. Enfin, pour éviter que les coefficients négatifs de collision nulle n'entraînent une erreur relative trop importante, nous avons augmenté la valeur du champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ pour la maille à laquelle appartient \mathbf{x} et pour un petit intervalle spectral de 1cm^{-1} , lorsque la condition $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) > 0$ n'est pas respectée. Cela permet ainsi d'éviter que, dans la suite de la réalisation ou même de la simulation, cet événement particulier, source de variance, ne se reproduise. Dans la mesure où l'on ne modifie pas le poids associé à la collision pour laquelle $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) < 0$, cette procédure n'entraîne aucun biais (puisque le champ de $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ est entièrement arbitraire) et permet de contrôler d'éventuelles augmentations importantes de variance. En poussant ce raisonnement un peu plus loin, on peut imaginer des spectres de \hat{k}_η qui s'enrichiraient au cours des simulations pour réduire petit à petit le nombre de coefficients $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ négatifs rencontrés lors d'un calcul.

Aussi, grâce à ce processus de validation, nous sommes confiants quant à la précision et au caractère non-biaisé de l'approche introduite dans ce chapitre pour des configurations typiques de celles proposées dans le benchmark de [André et Vaillon, 2010] (en termes de compositions chimiques, de propriétés thermodynamiques et de tailles caractéristiques). Mais pour d'autres champs applicatifs, nous suggérons que la variance de la variance soit systématiquement calculée et que des simulations déterministes soient associées aux premiers exercices d'exploration. Nous pensons en particulier aux applications atmosphériques et astrophysiques dans lesquelles les distances d'intérêt sont beaucoup plus importantes et pour lesquelles les faibles pressions induisent des profils de raies très étroits (qui pourraient être susceptibles de complexifier la procédure d'échantillonnage des transitions ou des nombres d'onde). Mais pour des applications usuelles de combustion, la statistique semble être bien maîtrisée avec les propositions faites ici, et il n'y a pas de surprise que 10^5 échantillons soient suffisants pour évaluer avec une précision d'1% une grandeur radiative qui implique des millions de transitions. En effet, un grand nombre de transitions moléculaires sont prises en compte pour le calcul d'un seul poids de Monte-Carlo, et les probabilités associées à chacune de ces transitions ont été choisies de sorte à ce que les transitions non-échantillonnées aient une contribution similaire à celles échantillonnées.

Résumé du chapitre

Une conséquence directe de l'introduction de collisions nulles dans l'équation du transfert radiatif est que les coefficients d'absorption n'apparaissent plus dans le terme d'extinction exponentielle, mais seulement de façon linéaire dans les albédos. À travers ce chapitre, nous avons montré comment, grâce à cette propriété, il est possible de décrire de façon statistique les coefficients d'absorption à partir des transitions moléculaires, directement au sein de l'équation du transfert radiatif. Le calcul d'une grandeur radiative est alors ramené à une simple estimation d'espérance. Cela conduit alors au développement d'algorithmes de Monte-Carlo de référence, permettant d'estimer une observable radiative directement à partir de bases de données spectroscopiques, sans passer par une coûteuse production de spectres d'absorption. La mise en pratique de cette approche requiert cependant de définir un grand nombre de paramètres arbitraires ayant des conséquences importantes sur la qualité de convergence de ces algorithmes. Nous nous sommes alors appuyé sur un benchmark de six cas d'étude caractéristiques de configurations de combustion pour proposer un choix concernant ces paramètres libres. Ces propositions sont probablement loin d'être optimales, mais elles permettent d'assurer de bons taux de convergence quel que soit le cas d'étude : quelques secondes sont nécessaires pour estimer, sans approximation de modèle ou numérique, avec une précision de 1%, une luminance intégrée sur tout le domaine infrarouge. Les perspectives qu'offre une telle méthode sont nombreuses du fait qu'elle ne nécessite plus de production rigoureuse de spectres d'absorption haute-résolution. D'un point de vue numérique, il n'est plus nécessaire à chaque changement d'hypothèse spectrale ou de base de données spectroscopique de produire à nouveau un jeu complet de spectres. Cette méthode a également des conséquences en termes d'analyse, il devient notamment possible de calculer de façon exacte la sensibilité d'une grandeur radiative intégrée spectralement à un paramètre du modèle de raie, aux variables d'état thermodynamiques ou encore aux fractions molaires d'espèces présentes dans le milieu gazeux d'étude.

Conclusions et perspectives

Au cours de ces trois années de thèse, nous avons tenté de répondre à deux difficultés majeures inhérentes à l'étude et à la simulation du transfert radiatif dans les milieux gazeux : la non-uniformité et la dépendance spectrale des propriétés radiatives. Quels que soient les champs applicatifs (combustion, atmosphérique, astrophysique, *etc.*), la prise en compte et le traitement de la variation spatiale et spectrale des propriétés radiatives, en particulier du coefficient d'absorption, représentent des enjeux importants lors de l'étude du transfert radiatif dans les milieux gazeux.

Face à la forte complexité qu'implique cette double dépendance, il a semblé pertinent, plutôt que de se concentrer sur des modèles approchés ou sur des approches basées sur une description quasi-déterministe des propriétés radiatives, de repenser ce problème sous un nouvel angle, celui-ci purement statistique. Le souhait était alors de tirer parti des bénéfices qu'offrent ces approches statistiques et les outils de simulation stochastiques qui en découlent (approches exactes, estimations non biaisées, faible dépendance à la complexité du cas d'étude, pouvoir d'analyse, *etc.*). Nous nous sommes alors engagés dans un travail très exploratoire, bien que constituant le prolongement logique d'une dynamique collective, impulsée depuis plusieurs années par le groupe STARWest.

Dans des considérations purement statistiques, il est apparu que l'élément de blocage majeur ne résidait pas dans la description de la dépendance spatiale et spectrale des propriétés radiatives, mais dans le terme d'extinction du rayonnement présent dans l'expression intégrale de l'équation du transfert radiatif. Cette extinction exponentielle introduit, en effet, une non-linéarité dans la formulation statistique du problème radiatif qui ne permet autre chose que de recourir à des modèles ou méthodes approchées pour calculer de façon déterministe cette extinction.

Nous nous sommes alors penchés sur une technique employée intensivement, depuis plus de 50 ans, dans plusieurs domaines de la physique du transport corpus-

culaire : les algorithmes à collisions nulles. À notre connaissance, aucune mention de cette approche n'avait alors été faite dans la communauté du rayonnement thermique. D'un point de vue cinétique, cette technique consiste à ajouter aux événements d'absorption et de diffusion, un troisième type de collision : les collisions nulles. Ces dernières, assimilables à des événements de diffusion vers l'avant n'ont aucun effet sur le transport de photons.

Puisque sans effet sur la physique du rayonnement, ces collisions nulles peuvent être définies librement, de sorte à rendre le champ du nouveau coefficient d'extinction (résultant de ces trois types de collisions) uniforme ou suffisamment simple pour que le terme d'extinction soit pris en compte de façon analytique. Une conséquence directe de cette reformulation est que les coefficients d'absorption et de diffusion apparaissent désormais uniquement de façon linéaire dans l'équation du transfert radiatif. Nous avons alors montré comment il est possible de les prendre en compte de façon exacte (sans avoir à discrétiser au préalable le milieu) et qu'il est surtout possible de repenser de façon statistique l'expression même du coefficient d'absorption à partir des transitions moléculaires (la production de spectres d'absorption n'est alors plus nécessaire). Cette introduction arbitraire de collisions nulles ramène alors tout calcul d'observables radiatives à un simple problème d'estimation d'espérance, qui peut être traité sans biais par des méthodes de Monte-Carlo.

Grâce aux algorithmes à collisions nulles, il n'est donc plus nécessaire ni de discrétiser les propriétés d'un milieu participant, ni de faire appel à des spectres d'absorption haute-résolution pour estimer de façon exacte une observable radiative. Ces travaux, essentiellement formels, nous ont alors amenés à proposer des méthodes de simulation du transfert radiatif, ne requérant aucun modèle approché sous-jacent et estimant directement une observable radiative, pour les conditions locales exactes de pression, de température et de fractions molaires, à partir d'un échantillonnage des transitions moléculaires réalisé directement depuis les bases de données spectroscopiques. Comme schématisé à la [Fig. 6.1](#), un grand nombre des étapes intermédiaires, communément réalisées lors de l'étude du rayonnement en milieu gazeux, est ainsi supprimé. Il n'est en particulier plus nécessaire, pour tenir compte de la forte variation des propriétés radiatives du milieu gazeux, de recourir à des méthodes de discrétisation (production de spectres haute-résolution, maillage volumique du milieu participant), à des modèles approchés (modèles spectraux simplifiés) ou encore à des procédures d'interpolation généralement employées pour évaluer localement le coefficient d'absorption, qui sont potentiellement sources d'erreurs.

La proposition faite dans ce manuscrit conduit donc au développement de méthodes de référence de modélisation et de simulation du transfert radiatif en milieu gazeux. On entend par "méthodes de référence", le fait que seule la qualité des données utilisées en entrée d'algorithme (qui ne relèvent pas directement de notre compétence : bases de données spectroscopiques, champs de température, de pression et de fractions molaires) ainsi que les hypothèses radiatives considérées (profils de raie, prise en compte de la diffusion, *etc.*) sont susceptibles d'altérer la

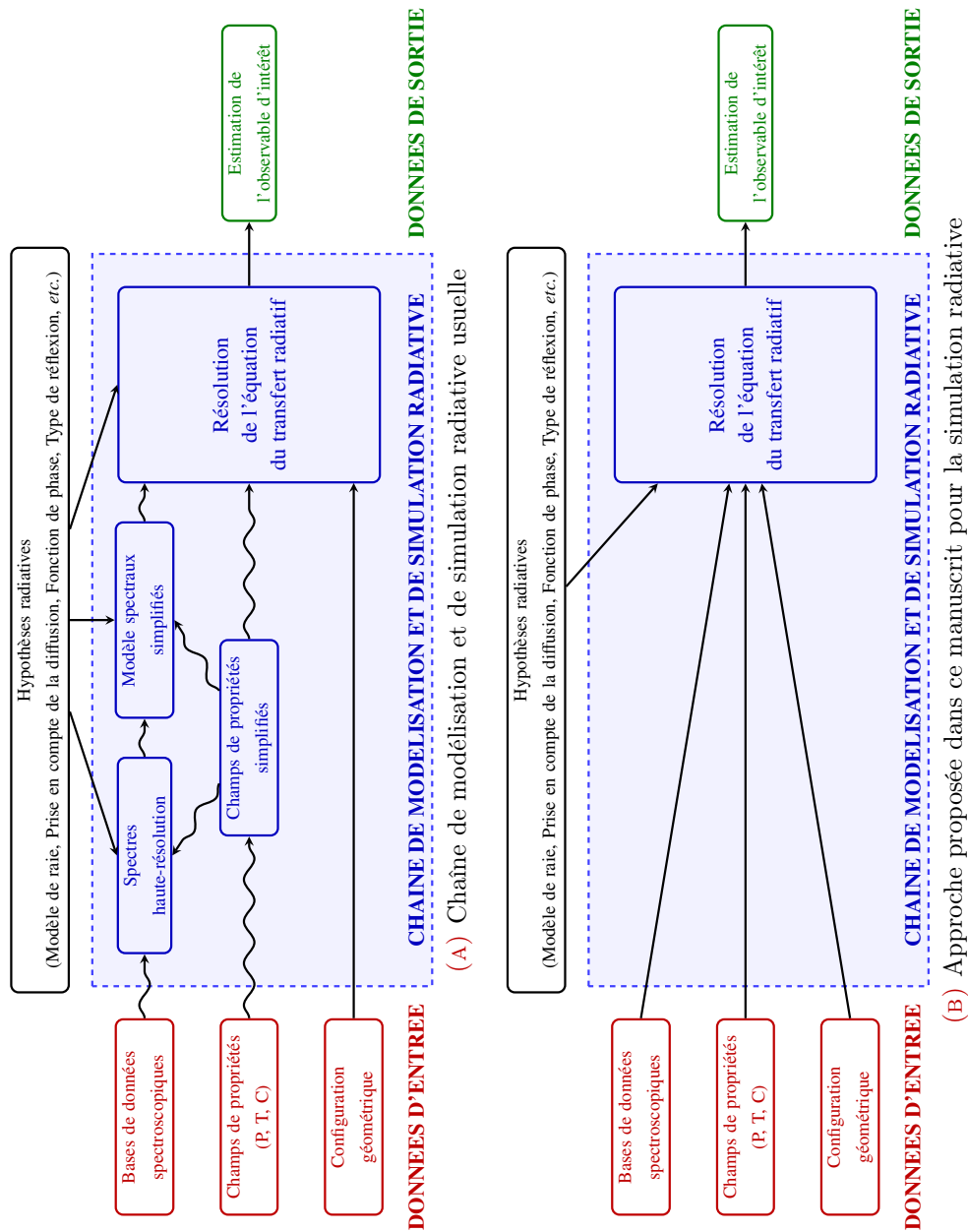


FIGURE 6.1 – Les algorithmes à collisions nulles permettent de supprimer toute approximation (symbolisées par des flèches courbes) liée à la description et la prise en compte des propriétés du milieu. Les méthodes de discrétisation (production de spectres haute-résolution, maillage volumique du milieu participant), les modèles spectraux approchés et les procédures d'interpolation, généralement employées pour évaluer localement les propriétés radiatives, sont ainsi évités.

validité du résultat. La méthode elle-même est rigoureusement exacte, puisque ne faisant appel à plus aucune approximation.

Ces propositions méthodologiques et algorithmiques ont par la suite été mises en pratique pour évaluer la faisabilité de telles approches. Dans un premier temps, seule la gestion de la non-uniformité des propriétés radiatives du milieu a été étudiée pour un cas d'étude relativement complexe : estimation d'un bilan radiatif au sein d'un milieu participant absorbant/émettant/diffusant présent au sein d'une cavité partiellement réfléchissante. Les résultats obtenus sont satisfaisants, proches en termes de temps de calcul de ceux de méthodes de Monte-Carlo traditionnelles et plus précis, dans la mesure où aucune approximation n'a été faite concernant la description des propriétés du milieu. Ces travaux ont mis en évidence l'importance du choix arbitraire du champ de coefficient de collision nulle sur le comportement algorithmique : celui-ci doit être défini de sorte à rendre le champ du coefficient d'extinction résultant suffisamment simple pour permettre un calcul analytique du terme d'extinction, être proche du coefficient réel d'extinction et majorant de préférence ce dernier. Lorsque cette dernière condition n'est pas respectée, une augmentation importante de la variance associée à l'estimation est susceptible d'être rencontrée. Cette méthode a également été mise en pratique dans le cadre de la validation d'un code de transfert radiatif estimant des bilans radiatifs dans une configuration réaliste de chambre de combustion.

Les algorithmes à collisions nulles nous ont ensuite permis de décomposer de façon statistique les coefficients d'absorption dans l'équation du transfert radiatif pour permettre une intégration spectrale qui s'appuie uniquement sur un échantillonnage des bases de données spectroscopiques et non sur des spectres d'absorption. Cette reformulation nécessite la définition d'un grand nombre de paramètres arbitraires. Ces choix, en particulier ceux du champ de coefficient de collision nulle et des probabilités associées à chacune des transitions, ne sont pas anodins dans la mesure où ils conditionnent fortement le taux de convergence et le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo. Nous nous sommes alors appuyés sur un benchmark composé de six cas d'étude (monodimensionnels et non-diffusant) caractéristiques de configurations rencontrées dans des problématiques de combustion. Ce benchmark nous a permis, par une démarche relevant de l'essai-erreur associée à une approche par variance nulle, de proposer des choix de paramètres libres menant à des taux de convergence acceptables pour chacun des cas du benchmark. Bien que les choix de paramètres libres soient grandement perfectibles, les résultats obtenus pour chacune de ces six configurations semblent encourageants et prouvent la faisabilité pratique de l'approche proposée. Quelques secondes sont nécessaires pour estimer avec une précision de 1% et sans la moindre approximation, une luminance intégrée sur tout le domaine infrarouge.

Toutefois, tout au long de ce processus de validation, nous avons rencontré des comportements statistiques de type "événements rares" qui sont susceptibles, s'ils ne sont pas échantillonnés ou remaniés, d'altérer la validité statistique de l'estimation. Ces événements rares étant directement liés aux choix des paramètres

libres, nous sommes convaincus qu'un travail conséquent s'ouvre pour définir de meilleures propositions. Comme souvent dans les approches statistiques, une optimisation significative des probabilités arbitraires n'est possible que grâce à une meilleure compréhension et une meilleure modélisation des phénomènes physiques d'intérêt. Aussi, nous pensons que pour le cas présent, un choix pertinent de paramètres libres devra nécessairement s'appuyer sur les concepts et modèles issus de la spectroscopie moléculaire. Outre le gain en termes de comportement statistique, de meilleurs choix de paramètres libres se traduiront par une diminution du nombre de collisions nulles et donc par une meilleure efficacité de l'algorithme.

Toutefois, avec les choix de paramètres libres proposés, ces événements pathologiques semblent maîtrisés pour les cas d'étude considérés. Le travail d'analyse statistique que nous avons réalisé nous permet d'avoir confiance dans les résultats affichés et nous pensons que la proposition faite dans ce manuscrit peut être appliquée de façon assurée pour des configurations de combustion proches de celles réunies dans le benchmark étudié. Une attention particulière devra cependant être portée si l'on s'éloigne, en termes de compositions chimiques et de conditions thermodynamiques, de ces configurations particulières.

Les travaux présentés dans ce manuscrit offrent des perspectives numériques et pratiques directes. La première d'entre-elles concerne la validation d'outils de simulation radiative et de modèles spectraux approchés. En effet, nous disposons désormais d'un outil permettant de calculer une observable radiative, dans des temps de calcul corrects dans un cadre de validation, sans recourir à une quelconque approximation et à une étape très coûteuse de production de spectres haute-résolution. L'approche proposée présente également une grande flexibilité quant aux choix des modèles radiatifs : tout type de champ de propriétés (analytique, maillé, *etc.*) peut être traité de façon rigoureuse. De plus, la quantité de transitions contenues dans les bases de données spectroscopiques et les hypothèses spectrales retenues (troncature de raies, sélection de raies par intensité) n'ont qu'une influence mineure sur la précision et les temps de calcul. En outre, cette méthode reposant désormais sur une formulation entièrement statistique, il devient possible d'augmenter la complexité du cas d'étude (intégration volumique, temporelle, ajout de phénomènes de diffusion, géométrie réelle, *etc.*) sans qu'un effet sensible sur les taux de convergence algorithmiques ne se ressente.

Au-delà de ces intérêts numériques, la méthode présentée ici ouvre des perspectives séduisantes en termes d'analyse. Le fait que le calcul d'une observable radiative intégrée ne soit plus basé sur des spectres d'absorption nous permet de tester les effets qu'ont sur cette grandeur les choix d'un modèle de raie, d'une hypothèse radiative ou spectrale, d'une base de données spectroscopique ou encore d'un maillage particuliers, sans avoir à reproduire à chaque changement de modèle un jeu complet de spectres haute-résolution. Il devient même envisageable de calculer de façon exacte, en parallèle de la grandeur radiative, sa sensibilité paramétrique à une variable d'état thermodynamique, à un paramètre du modèle de raie ou encore

à la fraction molaire d'une espèce.

À plus court terme, et de façon plus concrète, nous voyons trois principaux travaux se dessiner. Le premier serait, à l'instar de la [Sec. 4.3](#), d'appliquer l'algorithme de Monte-Carlo avec échantillonnage des transitions (présenté au [Chap. 5](#)) à un cas d'étude offrant une plus grande complexité (géométrie fermée tridimensionnelle et partiellement réfléchissante, milieu diffusant, calcul d'un bilan radiatif) pour s'assurer que le renforcement de la complexité du problème étudié n'entraîne pas de changement du comportement statistique et numérique de l'algorithme.

Le second travail, vers lequel nous nous orientons, sera d'étendre les cas d'étude traités dans ce manuscrit, essentiellement liés à des problématiques de combustion, à des configurations de type atmosphérique. En effet, deux principales particularités, qui n'ont pas été rencontrées durant ces travaux de thèse, pourraient avoir un effet important sur le comportement de l'algorithme. La première concerne les dimensions caractéristiques d'une atmosphère qui sont susceptibles d'augmenter l'effet des collisions nulles sur les temps de calcul. En effet, les épaisseurs optiques calculées à partir du champ d'extinction $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ peuvent être beaucoup plus importantes que celles rencontrées dans des contextes de combustion. La seconde particularité concerne la variation de pression. Dans ce manuscrit, l'ensemble des configurations étudiées sont à pression atmosphérique, toutefois une diminution de la pression engendre une réduction des largeurs de raies qui pourrait se traduire par des procédures d'échantillonnage de raies plus complexes à mettre en œuvre.

Enfin, les derniers travaux envisagés, probablement les plus délicats, seront de repenser totalement les choix de paramètres libres proposés dans ce manuscrit, en particulier ceux concernant le champ du coefficient d'extinction $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ et des probabilités associées à chaque transition moléculaire. Les propositions faites ici n'avaient pour unique but que de prouver la faisabilité pratique de l'approche avancée. Cependant, nous sommes persuadés qu'un travail plus théorique que celui retranscrit dans le présent document, fondé sur les concepts et modèles de spectroscopie moléculaire, est nécessaire pour assurer une meilleure maîtrise du comportement statistique de la méthode et pour proposer des outils de référence plus efficaces.

Annexes

Sensibilité à un paramètre de la fonction de phase

Dans la [Sec. 3.4.3](#), il est proposé de calculer la sensibilité de la luminance

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_1) \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.1})$$

à un paramètre ϖ , uniquement présent dans l'expression de la fonction de phase $\phi(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_j)$. Calculer la sensibilité de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ au paramètre ϖ revient à dériver cette dernière par rapport à ϖ :

$$\begin{aligned} \partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^\infty dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) \times 0 \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \left\{ \begin{aligned} &\partial_\varpi \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \\ &+ \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

Nous souhaitons ici garder la même structure statistique et algorithmique que celle de l'[Eq. A.1](#) pour permettre un calcul simultané de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ et sa sensibilité paramétrique $\partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Nous cherchons donc à écrire $\partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$

sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{\infty} dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) w_{\varpi,1} \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \int_0^{\infty} dl_2 p_{\mathcal{L}_2}(l_2) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_2) w_{\varpi,2} \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_2)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_2 \phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2) \int_0^{\infty} dl_3 p_{\mathcal{L}_3}(l_3) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_3) w_{\varpi,3} \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_3)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_3 \phi(\mathbf{x}_3, \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_3) \int_0^{\infty} dl_4 p_{\mathcal{L}_4}(l_4) \\ &\times \{ \dots \} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

où :

- $w_{\varpi,1}$ correspond au poids de Monte Carlo si une absorption a lieu à la première collision
- $w_{\varpi,2}$ correspond au poids de Monte Carlo si une absorption a lieu à la seconde collision (la première étant un événement de diffusion)
- $w_{\varpi,3}$ correspond au poids de Monte Carlo si une absorption a lieu à la troisième collision (les deux premières étant des événements de diffusion)
- ...

Tout l'exercice consistera donc à exprimer ces différents poids de Monte Carlo et à proposer, à partir de ces poids, une expression de variable aléatoire W_{ϖ} validant $\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E}[W_{\varpi}]$.

Pour garder la même structure que celle de l'Eq. A.3, l'Eq. A.2 peut être reformulée en :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{\infty} dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) \times 0 \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \left[\begin{aligned} &\frac{\partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))]}{+ \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1)} L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

On remarque alors que le poids de Monte Carlo $w_{\varpi,1}$ est donné par :

$$w_{\varpi,1} = 0 \quad (\text{A.5})$$

et que l'expression de $\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ fait désormais appel à deux termes récurrents

$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ et $\partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$, respectivement donnés par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \quad (\text{A.6})$$

et

$$\partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty dl_{j+1} p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) \times 0 \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1})) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_{j+1} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) \\ \times \left[\begin{array}{l} \partial_\varpi [\ln(\phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}))] L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) \\ + \partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) \end{array} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{A.7})$$

Il est alors possible de développer l'Eq. A.4 :

$$\partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) \times 0 \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \int_0^\infty dl_2 p_{\mathcal{L}_2}(l_2) \\ \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_2) [\partial_\varpi [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))] L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_2)] \\ + (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_2)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_2 \phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2) \\ \times \left[\begin{array}{l} \partial_\varpi [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))] \\ + \partial_\varpi [\ln(\phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2))] \end{array} \right] L_\eta(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_2) \\ + \partial_\varpi L_\eta(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_2) \end{array} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{A.8})$$

pour exprimer le poids $w_{\varpi,2}$:

$$w_{\varpi,2} = \partial_\varpi [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))] L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_2) \quad (\text{A.9})$$

En poursuivant le développement de l'Eq. A.8 :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{\infty} dl_1 p_{\mathcal{L}_1}(l_1) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1) \times 0 \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_1)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_1 \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1) \int_0^{\infty} dl_2 p_{\mathcal{L}_2}(l_2) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_2) [\partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))] L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_2)] \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_2)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_2 \phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2) \int_0^{\infty} dl_3 p_{\mathcal{L}_3}(l_3) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_3) \left[\begin{aligned} &\partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0 | \mathbf{u}_1))] \\ &+ \partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_1 | \mathbf{u}_2))] \end{aligned} \right] L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_3) \\ &+ (1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_3)) \int_{4\pi} d\mathbf{u}_3 \phi(\mathbf{x}_3, \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_3) \int_0^{\infty} dl_4 p_{\mathcal{L}_4}(l_4) \\ &\times \{ \dots \} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

on voit apparaître un schéma récursif dans l'expression des poids $w_{\varpi,j}$, qui s'expriment alors comme :

$$w_{\varpi,j} = L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_j) \sum_{m=1}^{j-1} \partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{x}_m, \mathbf{u}_{m-1} | \mathbf{u}_m))] \quad (\text{A.11})$$

Il est enfin possible d'exprimer en toute généralité la variable aléatoire W_{ϖ} validant $\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E}[W_{\varpi}]$:

$$W_{\varpi}(\mathbf{X}^*) = L_{\eta}^{eq}(\mathbf{X}^*) \sum_{j=1}^{\infty} \left(A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \right) \left(\sum_{q=1}^{j-1} \partial_{\varpi} [\ln(\phi(\mathbf{X}_q, \mathbf{u}_{q-1} | \mathbf{u}_q))] \right) \quad (\text{A.12})$$

où A_q est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$ et 0 avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_q)$ et où \mathbf{X}^* est définie de la même façon que pour l'estimation de $L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (voir Eq. 3.71).

ANNEXE B

Sensibilité à un paramètre du coefficient $h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$

Dans la [Sec. 5.2.1](#), il est proposé de calculer la sensibilité de la luminance

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) \frac{1}{p_H(\eta)} d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m_1=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_1}(\mathbf{x}_1) \sum_{\iota_1=1}^{N_{\iota}(m_1)} \mathcal{P}_{\iota_1}(\mathbf{x}_1) \quad (\text{B.1})$$

$$\times [\mathcal{P}_{a,\iota_1}(\mathbf{x}_1) L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1) + (1 - \mathcal{P}_{a,\iota_1}(\mathbf{x}_1)) L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0)]$$

à un paramètre ϖ du coefficient d'absorption $h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ associé à la transition ι (*ex* : paramètre du profil de raie ou concentration de l'espèce m). Ce coefficient $h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$ n'est présent, de façon implicite, que dans l'expression de la probabilité $\mathcal{P}_{a,\iota}(\mathbf{x}_1) = h_{a,m,\iota,\eta}(\mathbf{x}) / \hat{h}_{m,\iota,\eta}(\mathbf{x})$. Calculer la sensibilité de la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ au paramètre ϖ revient à dériver cette dernière par rapport à ϖ :

$$\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) \frac{1}{p_H(\eta)} d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m_1=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_1}(\mathbf{x}_1) \sum_{\iota_1=1}^{N_{\iota}(m_1)} \mathcal{P}_{\iota_1}(\mathbf{x}_1)$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_{a,\iota_1}(\mathbf{x}_1) \times 0 + \partial_{\varpi} \mathcal{P}_{a,\iota_1}(\mathbf{x}_1) L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1) \\ + (1 - \mathcal{P}_{a,\iota_1}(\mathbf{x}_1)) \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) + \partial_{\varpi} (1 - \mathcal{P}_{a,\iota_1}(\mathbf{x}_1)) L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \end{array} \right\} \quad (\text{B.2})$$

Nous souhaitons ici garder la même structure statistique et algorithmique que celle de l'[Eq. B.1](#) pour permettre un calcul simultané de la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ et sa sensibilité paramétrique $\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Nous cherchons donc à écrire $\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ sous

la forme :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m_1=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_1}(\mathbf{x}_1) \sum_{i_1=1}^{N_i(m_1)} \mathcal{P}_{i_1}(\mathbf{x}_1) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1) w_{\varpi,1} \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_2}(l_2) dl_2 \sum_{m_2=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_2}(\mathbf{x}_2) \sum_{i_2=1}^{N_i(m_2)} \mathcal{P}_{i_2}(\mathbf{x}_2) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2) w_{\varpi,2} \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_3}(l_3) dl_3 \sum_{m_3=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_3}(\mathbf{x}_3) \sum_{i_3=1}^{N_i(m_3)} \mathcal{P}_{i_3}(\mathbf{x}_3) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_3}(\mathbf{x}_3) w_{\varpi,3} \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_3}(\mathbf{x}_3)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_4}(l_4) dl_4 \sum_{m_4=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_4}(\mathbf{x}_4) \sum_{i_4=4}^{N_i(m_4)} \mathcal{P}_{i_4}(\mathbf{x}_4) \\ & \times \{ \dots \} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

où :

- $w_{\varpi,1}$ correspond au poids de Monte Carlo si une absorption a lieu à la première collision
- $w_{\varpi,2}$ correspond au poids de Monte Carlo si une absorption a lieu à la seconde collision (la première étant une collision nulle)
- $w_{\varpi,3}$ correspond au poids de Monte Carlo si une absorption a lieu à la troisième collision (les deux premières étant des collisions nulles)
- ...

Tout l'exercice consistera donc à exprimer ces différents poids de Monte Carlo et à proposer, à partir de ces poids, une expression de variable aléatoire W_{ϖ} validant $\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E}[W_{\varpi}]$.

Pour garder la même structure que celle de l'Eq. B.3, l'Eq. B.2 peut être reformulée en :

$$\begin{aligned} \partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m_1=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_1}(\mathbf{x}_1) \sum_{i_1=1}^{N_i(m_1)} \mathcal{P}_{i_1}(\mathbf{x}_1) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1) \left[\partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1)}{p_H(\eta)} \right] \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1)) \frac{1}{p_H(\eta)} \left[\partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] L_{\eta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \right] \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

On remarque alors que le poids de Monte Carlo $w_{\varpi,1}$ est donné par :

$$w_{\varpi,1} = \partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1)}{p_H(\eta)} \quad (\text{B.5})$$

et que l'expression de $\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ fait désormais appel à deux termes récurrents $L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)$ et $\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)$, respectivement donnés par :

$$L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \sum_{m_{j+1}=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}) \sum_{i_{j+1}=1}^{N_i(m_{j+1})} \mathcal{P}_{i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}) \quad (\text{B.6})$$

$$\times [\mathcal{P}_{a,i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}) L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) + (1 - \mathcal{P}_{a,i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1})) L_{\eta}(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0)]$$

et

$$\partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \sum_{m_{j+1}=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}) \sum_{i_{j+1}=1}^{N_i(m_{j+1})} \mathcal{P}_{i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1})$$

$$\times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}) [\partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}))] L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_{j+1})] \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1})) \left[\begin{aligned} & \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_{j+1}}(\mathbf{x}_{j+1}))] L_{\eta}(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0) \\ & + \partial_{\varpi} L_{\eta}(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.7})$$

Il est alors possible de développer l'**Eq. B.4** :

$$\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m_1=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_1}(\mathbf{x}_1) \sum_{i_1=1}^{N_i(m_1)} \mathcal{P}_{i_1}(\mathbf{x}_1)$$

$$\times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1) \left[\partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1)}{p_H(\eta)} \right] \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_2}(l_2) dl_2 \sum_{m_2=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_2}(\mathbf{x}_2) \sum_{i_2=1}^{N_i(m_2)} \mathcal{P}_{i_2}(\mathbf{x}_2) \\ & \times \left\{ \begin{aligned} & \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2) \left[\left\{ \begin{aligned} & \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \right\} \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_2)}{p_H(\eta)} \right] \\ & + (1 - \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2)) \frac{1}{p_H(\eta)} \left\{ \begin{aligned} & \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \\ & + \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2))] \end{aligned} \right\} L_{\eta}(\mathbf{x}_2, \mathbf{u}_0) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.8})$$

pour exprimer le poids $w_{\varpi,2}$:

$$w_{\varpi,2} = \left\{ \begin{aligned} & \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \\ & + \partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2))] \end{aligned} \right\} \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_2)}{p_H(\eta)} \quad (\text{B.9})$$

En poursuivant le développement de l'Eq. B.8 :

$$\begin{aligned}
 \partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) d\eta \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_1}(l_1) dl_1 \sum_{m_1=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_1}(\mathbf{x}_1) \sum_{i_1=1}^{N_i(m_1)} \mathcal{P}_{i_1}(\mathbf{x}_1) \\
 &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1) \left[\partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_1)}{p_H(\eta)} \right] \\ &+ (1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_2}(l_2) dl_2 \sum_{m_2=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_2}(\mathbf{x}_2) \sum_{i_2=1}^{N_i(m_2)} \mathcal{P}_{i_2}(\mathbf{x}_2) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2) \left[\left\{ \begin{aligned} &\partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \\ &+ \partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2))] \end{aligned} \right\} \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_2)}{p_H(\eta)} \right] \\ &+ (1 - \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_3}(l_3) dl_3 \sum_{m_3=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_3}(\mathbf{x}_3) \sum_{i_3=1}^{N_i(m_3)} \mathcal{P}_{i_3}(\mathbf{x}_3) \\ &\times \left\{ \begin{aligned} &\mathcal{P}_{a,i_3}(\mathbf{x}_3) \left[\left\{ \begin{aligned} &\partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_1}(\mathbf{x}_1))] \\ &+ \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_2}(\mathbf{x}_2))] \\ &+ \partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_3}(\mathbf{x}_3))] \end{aligned} \right\} \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_3)}{p_H(\eta)} \right] \\ &+ (1 - \mathcal{P}_{a,i_3}(\mathbf{x}_3)) \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_4}(l_4) dl_4 \sum_{m_4=1}^{N_m} \mathcal{P}_{m_4}(\mathbf{x}_4) \sum_{i_4=1}^{N_i(m_4)} \mathcal{P}_{i_4}(\mathbf{x}_4) \\ &\times \{ \dots \} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (B.10)
 \end{aligned}$$

on voit apparaître un schéma récursif dans l'expression des poids $w_{\varpi,j}$, qui s'expriment alors comme :

$$w_{\varpi,j} = \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_j)}{p_H(\eta)} \partial_{\varpi} [\ln(\mathcal{P}_{a,i_j}(\mathbf{x}_j))] \sum_{q=1}^{j-1} \partial_{\varpi} [\ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_q}(\mathbf{x}_q))] \quad (B.11)$$

Il est enfin possible d'exprimer en toute généralité la variable aléatoire W_{ϖ} validant $\partial_{\varpi} L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E} [W_{\varpi}]$:

$$\begin{aligned}
 W_{\varpi}(\mathbf{X}^*) &= \frac{L_{\eta}^{eq}(\mathbf{X}^*)}{p_H(H)} \sum_{j=1}^{+\infty} \left(A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \right) \\
 &\times \left[\partial_{\varpi} \ln(\mathcal{P}_{a,i_j}(\mathbf{X}_j)) + \sum_{n=1}^{j-1} \partial_{\varpi} \ln(1 - \mathcal{P}_{a,i_n}(\mathbf{X}_n)) \right] \quad (B.12)
 \end{aligned}$$

où A_q est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_{a,i_q}(\mathbf{x}_q)$ et 0 avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_{a,i_q}(\mathbf{x}_q)$ et où \mathbf{X}^* est définie de la même façon que pour l'estimation de $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ (voir Eq. 5.21).

Approche par variance nulle pour les choix de paramètres libres

Nous avons recouru dans la [Sec. 5.3.2](#) à une approche par variance nulle afin d'orienter le choix des différentes densités de probabilités et probabilités discrètes introduites dans notre reformulation de l'équation du transfert radiatif :

- la densité de probabilité associée aux nombres d'ondes : $p_H(\eta)$
- la densité de probabilité associée aux libres parcours : $p_{\mathcal{L}_j}(l_j) \equiv p_{\mathcal{L}_j}(l_j, \eta, \mathbf{x}_{j-1}, j)$
- les probabilités associées à chaque espèce moléculaire : $\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) \equiv \mathcal{P}_m(m, \eta, \mathbf{x}_j, j)$
- les probabilités associées à chaque raie : $\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j) \equiv \mathcal{P}_i(\iota, m, \eta, \mathbf{x}_j, j)$
- la probabilité d'absorption : $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j) \equiv \mathcal{P}_{a,i}(\iota, m, \eta, \mathbf{x}_j, j)$.

Les détails de cette approche font l'objet de la présente annexe.

Nous nous concentrons ici sur l'estimation de la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ intégrée spectralement entre η_{\min} et η_{\max} dans un milieu infini non-diffusant (l'ajout de parois ou d'événements de diffusion n'entraîne pas de difficulté supplémentaire, si ce n'est un alourdissement du formalisme mathématique) :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) d\eta \quad (\text{C.1})$$

où $L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ représente la luminance monochromatique :

$$L_{\eta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0 - l\mathbf{u}_0) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\eta}(l') dl'\right) dl \quad (\text{C.2})$$

En partant des reformulations intégrales prenant en compte l'ajout de collisions nulles et la décomposition du coefficient d'absorption en somme de participations de transitions (voir [Eq. 5.18](#) et [5.19](#)), il est possible d'introduire des densités de probabilité et probabilités discrètes (termes en rouge) de sorte à ce que chacune

d'entre-elles puisse être définie arbitrairement. Il vient :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} \frac{p_H(\eta) L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{p_H(\eta)} d\eta \quad (\text{C.3})$$

où :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{+\infty} p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \sum_{m=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1}) \\ &\times \frac{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \exp\left(-\int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l' \mathbf{u}_0) dl'\right)}{p_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1})} \\ &\times \left\{ \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{j+1}) \left[\frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{j+1})} \right] \right. \\ &\left. + (1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{j+1})) \left[\left(1 - \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_{j+1}) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_{j+1})} \right) \frac{L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_0)}{1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_{j+1})} \right] \right\} \quad (\text{C.4}) \end{aligned}$$

La luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ peut alors être exprimée comme une simple espérance : $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E}[W]$ où la variable aléatoire W est donnée par :

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{p_H(H)} \sum_{j=1}^{+\infty} A_j \frac{\hat{k}_H(\mathbf{X}_j) \exp\left(-\int_0^{\mathcal{L}_j} \hat{k}_H(\mathbf{X}_{j-1} - l' \mathbf{u}_0) dl'\right) h_{a,M,\mathcal{I},H}(\mathbf{X}_j) L_\eta^{eq}(\mathbf{X}_j)}{\hat{k}_H(\mathbf{X}_j) p_{\mathcal{L}_j}(\mathcal{L}_j) \mathcal{P}_M(\mathbf{X}_j) \mathcal{P}_{\mathcal{I}}(\mathbf{X}_j) \mathcal{P}_{a,\mathcal{I}}(\mathbf{X}_j)} \\ &\times \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \left\{ \frac{\hat{k}_H(\mathbf{X}_q) \exp\left(-\int_0^{\mathcal{L}_q} \hat{k}_H(\mathbf{X}_{q-1} - l' \mathbf{u}_0) dl'\right)}{p_{\mathcal{L}_q}(\mathcal{L}_q)} \right. \\ &\left. \times \left(1 - \frac{h_{a,M,\mathcal{I},H}(\mathbf{X}_q)}{\hat{k}_H(\mathbf{X}_q) \mathcal{P}_M(\mathbf{X}_q) \mathcal{P}_{\mathcal{I}}(\mathbf{X}_q)} \right) \frac{1}{1 - \mathcal{P}_{a,\mathcal{I}}(\mathbf{X}_q)} \right\} \quad (\text{C.5}) \end{aligned}$$

avec $A_j \equiv A_j(\mathcal{I}, M, H, \mathbf{X}_j)$, une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)$, 0 sinon.

L'approche par variance nulle présentée ici consiste à définir des probabilités $p_{H,\emptyset}(\eta)$, $\hat{p}_{\mathcal{L}_j,\emptyset}(l_j)$, $\mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$, $\mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$ et $\mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$ (indiquées \emptyset) telles que la variable aléatoire W ait une variance nulle et donc soit caractérisée par une distribution de type Dirac centrée en $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. En des termes plus algorithmiques, cela équivaut à dire qu'un seul échantillon (ou poids de Monte Carlo) w_i est suffisant pour estimer avec une erreur relative nulle la luminance $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. Nous allons, dans les paragraphes suivants, passer en revue chacune de ces cinq probabilités.

Définition de $p_{H,\emptyset}(\eta)$

La première probabilité d'intérêt est celle associée aux nombres d'ondes : $p_H(\eta)$. Son introduction dans l'Eq. C.1 permet de reformuler l'expression de $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ comme une espérance :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_{\eta_{\min}}^{\eta_{\max}} p_H(\eta) W_\eta d\eta = \mathbb{E}[W_\eta] \quad (\text{C.6})$$

où la variable aléatoire W_η est donnée par

$$W_\eta = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{p_H(\eta)} \quad (\text{C.7})$$

L'approche à variance nulle consiste ici à exprimer la densité de probabilité de nombres d'ondes, notée $p_{H,\emptyset}(\eta)$, telle que la variable aléatoire W_η validant $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \mathbb{E}[W_\eta]$ soit égale à $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. En résolvant l'équation $W_\eta = L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, nous obtenons alors :

$$p_{H,\emptyset}(\eta) = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} \quad (\text{C.8})$$

Toutefois cette probabilité idéale ne peut pas être utilisée en l'état dans l'algorithme de Monte Carlo. Elle nécessite en effet la connaissance de $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ et de $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ qui est justement la grandeur que nous souhaitons estimer. Cependant, l'information qu'apporte cette approche par variance nulle est digne d'intérêt : nous avons pu exprimer la densité de probabilité qu'il faudra chercher à approcher au mieux. Aussi, le travail d'optimisation consistera à proposer un modèle spectral de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ permettant de définir une densité de probabilité $p_H(\eta)$ manipulable (c'est à dire intégrable et inversible analytiquement). Plus ce modèle sera précis, plus la convergence de l'algorithme sera importante.

Définition de $\hat{p}_{\mathcal{L}_j,\emptyset}(l_j)$

Comme introduit dans le Chap. 4, l'ajout de collisions nulles à notre cas d'étude, permet de reformuler récursivement l'expression de la luminance monochromatique $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$:

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{+\infty} dl_j \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp \left(\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l' \mathbf{u}_0) dl' \right) \\ &\times \left[\frac{\hat{k}_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{\hat{k}_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} \right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

où les termes $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_{j-1} - l_j \mathbf{u}_0$ correspondent aux positions de collision. À partir de cette expression de la luminance monochromatique, il est possible d'introduire une densité de probabilité $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j)$ de sorte à exprimer cette grandeur comme une simple espérance :

$$L_\eta(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{u}_0) = \int_0^{+\infty} \hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j) W_{l_j} dl_j = \mathbb{E}[W_{l_j}] \quad (\text{C.10})$$

où la variable aléatoire W_{l_j} est donnée par :

$$W_{l_j} = \frac{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l' \mathbf{u}_0) dl'\right)}{\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j)} \times \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \right] \quad (\text{C.11})$$

La densité de probabilité $\hat{p}_{\mathcal{L}_j, \emptyset}(l_j)$ assurant une variance nulle de la variable aléatoire W_{l_j} est alors donné par :

$$\hat{p}_{\mathcal{L}_j, \emptyset}(l_j) = \frac{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l' \mathbf{u}_0) dl'\right)}{L_\eta(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{u}_0)} \times \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \right] \quad (\text{C.12})$$

On peut ainsi remarquer que la densité de probabilité de libres parcours $\hat{p}_{\mathcal{L}_j}(l_j) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l' \mathbf{u}_0) dl'\right)$ introduite dans le [Chap. 4](#) assure une variance nulle de W_{l_j} dans le cas particulier d'un milieu à l'équilibre thermodynamique : (*i.e.* lorsque $L_\eta(\mathbf{x}) = L_\eta^{eq}(\mathbf{x})$). D'autres modèles permettant d'approcher cette probabilité peuvent également être imaginés.

Définition de $\mathcal{P}_{m, \emptyset}(\mathbf{x}_j)$

Concentrons nous désormais sur le terme récursif

$$\mathcal{C}_j = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \quad (\text{C.13})$$

présent dans l'équation de la luminance (voir [Eq. C.11](#)). Il est possible, comme proposé dans le [Chap. 5](#), de décomposer le coefficient d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)$ comme une somme des participations $k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)$ de chaque espèce moléculaire m présente dans le mélange gazeux considéré. En introduisant une probabilité arbitraire $\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)$ associée à chacune de ces espèces, le terme \mathcal{C}_j de l'[Eq. C.11](#) peut être exprimé comme une simple espérance :

$$\mathcal{C}_j = \sum_{i=1}^{N_m} \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) W_m = \mathbb{E}[W_m] \quad (\text{C.14})$$

où la variable aléatoire W_m est donnée par :

$$W_m = \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \quad (\text{C.15})$$

Rechercher la probabilité $\mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$ assurant une variance nulle de W_m revient à résoudre l'équation $\mathcal{C}_j = W_m$ qui, développée, donne :

$$\begin{aligned} & \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \\ &= \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Il vient alors :

$$\boxed{\mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}} \quad (\text{C.17})$$

Pour un nombre d'onde et une position donnés, la probabilité idéale (*i.e.* assurant une variance nulle de W_m) de chaque espèce moléculaire correspond donc au rapport entre la participation de cette espèce au coefficient d'absorption divisée par le coefficient d'absorption du mélange. Dans le cas d'un gaz monomoléculaire on retrouve bien $\mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = 1$.

Définition de $\mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$

De la même façon il est possible de décomposer dans le terme

$$\mathcal{D}_j = \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \quad (\text{C.18})$$

(présent dans l'[Eq. C.15](#)) la participation d'une espèce donnée $k_{a,m,\eta}(\mathbf{x})$ en une somme de participations $h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x})$ de chaque transition i . En introduisant une probabilité $\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)$ associée à chaque transition, la grandeur \mathcal{D}_j peut être exprimée comme une simple espérance :

$$\mathcal{D}_j = \sum_{i=1}^{N_i(m)} \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j) W_i = \mathbb{E}[W_i] \quad (\text{C.19})$$

où la variable aléatoire W_i est donnée par :

$$W_i = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \quad (\text{C.20})$$

Rechercher la probabilité $\mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$ assurant une variance nulle de W_i revient à résoudre l'équation $\mathcal{D}_j = W_i$ qui développée donne :

$$\begin{aligned} & \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \\ &= \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j) \mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

Il vient alors :

$$\boxed{\mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}} \quad (\text{C.22})$$

Ici encore, la probabilité idéale qu'il faudrait associer à chaque transition est donnée par le rapport entre la participation de cette transition divisée par la participation de toutes les transitions de l'espèce considérée. À la vue des fortes variations spectrales et spatiales du coefficient d'absorption, on devine qu'approcher cette probabilité en toute généralité (pour tous nombre d'onde, pression et température) constituera une tâche difficile.

Définition de $\mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j)$

Enfin, la grandeur :

$$\mathcal{E}_j = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)}L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)}\right)L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \quad (\text{C.23})$$

peut être elle aussi exprimée comme une simple espérance en introduisant une probabilité arbitraire d'absorption $\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)$:

$$\mathcal{E}_j = \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)W_a + \left(1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)\right)W_n \quad (\text{C.24})$$

où les variables aléatoires :

$$W_a = \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)}L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) \quad (\text{C.25})$$

et

$$W_n = \frac{1}{1 - \mathcal{P}_{a,i}(\mathbf{x}_j)} \left(1 - \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_m(\mathbf{x}_j)\mathcal{P}_i(\mathbf{x}_j)}\right)L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \quad (\text{C.26})$$

Recourir à une approche par variance nulle pour ce test de Bernoulli particulier revient à résoudre le système :

$$\begin{cases} \mathcal{E}_j = W_a \\ \mathcal{E}_j = W_n \end{cases} \quad (\text{C.27})$$

Il vient :

$$\boxed{\mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j) = \frac{\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j)}{\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right)L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)}} \quad (\text{C.28})$$

qui constitue la probabilité optimale d'absorption. On retrouve également cette expression pour les algorithmes à collisions nulles standards (dans lesquels le coefficient d'absorption n'a pas été décomposé en somme de transitions, *i.e.* à partir de l'[Eq. C.9](#)).

En résumé

Les probabilités assurant une variance nulle de la variable aléatoire W donnée à l'Eq. C.5 sont donc les suivantes :

$$\begin{aligned}
 p_{H,\emptyset}(\eta) &= \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} \\
 \hat{p}_{\mathcal{L}_j,\emptyset}(l_j) &= \frac{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{l_j} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j-1} - l' \mathbf{u}_0) dl'\right)}{L_\eta(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{u}_0)} \\
 &\quad \times \left[\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0) \right] \\
 \mathcal{P}_{m,\emptyset}(\mathbf{x}_j) &= \frac{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)} \\
 \mathcal{P}_{i,\emptyset}(\mathbf{x}_j) &= \frac{h_{a,m,i,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{a,m,\eta}(\mathbf{x}_j)} \\
 \mathcal{P}_{a,i,\emptyset}(\mathbf{x}_j) &= \frac{\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j)}{\frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) + \left(1 - \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j)}\right) L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_0)}
 \end{aligned}$$

En développant ces probabilités idéales dans l'Eq. C.5, il vient :

$$\begin{aligned}
 W &= \frac{L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} \sum_{j=1}^{+\infty} A_j L_\eta(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{u}_0) \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \frac{L_\eta(\mathbf{x}_{q-1}, \mathbf{u}_0)}{L_\eta(\mathbf{x}_q, \mathbf{u}_0)} \\
 &= \frac{L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} \sum_{j=1}^{+\infty} A_j \left[L_\eta(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{u}_0) \prod_{q=1}^{j-1} \frac{L_\eta(\mathbf{x}_{q-1}, \mathbf{u}_0)}{L_\eta(\mathbf{x}_q, \mathbf{u}_0)} \right] \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \\
 &= \frac{L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} \sum_{j=1}^{+\infty} A_j L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \\
 &= L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \sum_{j=1}^{+\infty} A_j \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_q) \\
 &= L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)
 \end{aligned} \tag{C.29}$$

La variable aléatoire W étant égale à $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, l'approche par variance nulle est bien validée.

ARTICLE : Integral formulation of null-collision Monte Carlo algorithms [Galtier *et al.*, 2013]

Article publié dans *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2013, Issue 125, pp 57-68.
DOI : 10.1016/j.jqsrt.2013.04.001.¹

Auteurs : GALTIER M.^a, BLANCO S.^{b,c}, CALIOT C.^d, COUSTET C.^e, DAUCHET J.^f, EL HAFI M.^a, EYMET V.^g, FOURNIER R.^{b,c}, GAUTRAIS J.^h, KHUONG A.^h, PIAUD B.^e, TERRÉE G.^a

- a. *Université de Toulouse, Mines Albi, UMR 5302 - Centre de Recherche d'Albi en génie des Procédés des Solides Divisés, de l'Energie et de l'Environnement (RAPSOODEE), Campus Jarlard, F-81013, Albi CT cedex 09, France*
- b. *Université de Toulouse ; UPS, INPT ; LAPLACE (Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie) ; 118 route de Narbonne, F-31062 Toulouse cedex 9, France*
- c. *CNRS ; LAPLACE ; F-31062 Toulouse, France*
- d. *Processes, Materials and Solar Energy Laboratory (PROMES), CNRS, 7 rue du Four Solaire, Font-Romeu-Odeillo, F-66120, France*
- e. *HPC-SA, 3 chemin du Pigeonnier de la Cépière, Bâtiment C, F-31100, Toulouse, France*
- f. *Clermont Université, ENSCCF, Institut Pascal - UMR 6602, BP 10448, F-63000 Clermont-Ferrand, France*
- g. *Université Bordeaux 1, UMR 5804 - Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB), 2 rue de l'Observatoire BP 89, F-33271, Floirac Cedex, France*
- h. *Centre de Recherches sur la Cognition Animale, CNRS UMR5169, Université de Toulouse, France*

1. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407313001350>

D.1 Abstract

At the kinetic level, the meaning of null-collisions is straightforward : they correspond to pure-forward scattering events. We here discuss their technical significance in integral terms. We first consider a most standard null-collision Monte Carlo algorithm and show how it can be rigorously justified starting from a Fredholm equivalent to the radiative transfer equation. Doing so, we also prove that null-collision algorithms can be slightly modified so that they deal with unexpected occurrences of negative values of the null-collision coefficient (when the upper bound of the heterogeneous extinction coefficient is nonstrict). We then describe technically, in full details, the resulting algorithm, when applied to the evaluation of the local net-power density within a bounded, heterogeneous, multiple scattering and emitting/absorbing medium. The corresponding integral formulation is then explored theoretically in order to distinguish the statistical significance of introducing null-collisions from that of the integral-structure underlying modification.

Keywords : Monte Carlo ; Null-Collision ; Heterogeneous Media ; Integral formulation

D.2 Introduction

The introduction of null-collisions in the process of modelling photon transport consists in transforming the standard radiative transfer equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla f = -(k_a + k_s)cf + \mathcal{S} + \int_{4\pi} k_s cf' p(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \quad (\text{D.1})$$

into

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + c\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla f = & -(k_a + k_s + k_n)cf + \mathcal{S} + \\ & \int_{4\pi} k_s cf' p_S(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' + \int_{4\pi} k_n cf' \delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

where

- $f \equiv f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t)$ is the distribution function at location \mathbf{x} , propagation direction $\boldsymbol{\omega}$ and time t . The distribution function is used here, instead of the specific intensity $I = h\nu cf$, in order to help readers from other particle transport communities such as neutron transport, plasma physics and rarefied gas dynamics, that have made an intensive use of null-collision approaches [Skullerud, 1968, Woodcock *et al.*, 1965, Lin et Bardsley, 1978] (see [Sec. D.6.1](#) for a brief description of the rather complex structure of the corresponding literature).
- c is the speed of light, $k_a(\mathbf{x}, t)$ the absorption coefficient, $k_s(\mathbf{x}, t)$ the scattering coefficient, $p_S(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}') \equiv p_S(\boldsymbol{\omega}|\boldsymbol{\omega}', \mathbf{x})$ the single scattering phase function, that is to say the probability density that the scattering direction is $\boldsymbol{\omega}$ for a photon

initially in the direction $\boldsymbol{\omega}'$. The notation f' in the scattering source integral stands for $f' \equiv f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}', t)$.

- $\mathcal{S} \equiv \mathcal{S}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t)$ is any source term. We will define $s \equiv s(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}, t)$ such that $\mathcal{S} = k_a c s$, and therefore $s = f^{eq}(\mathbf{x}, t)$ in the particular case of thermal emission under the assumption of local thermodynamic equilibrium, where $f^{eq}(\mathbf{x}, t)$ is the distribution function at equilibrium at local temperature (related to the Planck specific intensity B according to $B = h\nu c f^{eq}$).
- k_n is the null-collision coefficient and δ is the Dirac distribution.

Additional collisions are introduced via the term $-k_n c f$ but these collisions are cancelled out, as they are scattering events in the pure forward direction (the phase function is $\delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}')$ in the scattering source integral), and leave the f field unchanged, which is a direct consequence of the property $\int_{4\pi} k_n c f' \delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' = k_n c f$. To the best of our knowledge, outside the above mentioned transport physics literature, the only reported practical use of null-collision approaches for radiative transfer applications are in the fields of computer graphics and medical imaging [Rehfeld et Stute, 2008] [Badal et Badano, 2009].

Such applications are related to Monte Carlo simulations in which the heterogeneity of the absorption and scattering coefficients does not allow the implementation of simple free path sampling algorithms. When defining the location of the next collision event, the common practice is indeed to first sample an extinction optical thickness τ according to the probability density function $p_T(\tau) = \exp(-\tau)$, and then derive the corresponding path length λ by inverting the function relating τ to λ : $\tau(\lambda) = \int_0^\lambda k(\mathbf{x} + \sigma\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}, t + \frac{\sigma}{c}) d\sigma$, where $k = k_a + k_s$. However, if k_a and k_s are complex functions of space, this inversion is difficult to perform analytically. Most usually, k_a is then approximated with discretization approaches, but this implies a rigorous control of the corresponding approximation level. Introducing null-collisions is a way to avoid such approximations.

A null-collision k_n field can indeed be introduced so that the modified extinction optical thickness $\hat{k} = k_a + k_s + k_n$ (corresponding to absorption plus true scattering plus null-collision) allows tractable $\tau(\lambda)$ inversions (e.g. \hat{k} uniform). Practically,

- \hat{k} is arbitrarily chosen as an upper bound of the true extinction field k ($\hat{k} > k$) and k_n is then defined as $k_n = \hat{k} - k$ (note that the choice is made on \hat{k} , not on k_n , so that \hat{k} has the expected inversion properties);
- a collision location is sampled by first sampling $\hat{\tau}$ according to p_T and inverting $\hat{\tau}(\lambda) = \int_0^\lambda \hat{k}(\mathbf{x} + \sigma\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}, t + \frac{\sigma}{c}) d\sigma$;
- a random number r is sampled uniformly on the unit interval and the collision is considered as an absorption event if $0 < r < \frac{k_a}{\hat{k}}$, as a real scattering event if $\frac{k_a}{\hat{k}} < r < \frac{k_a + k_s}{\hat{k}}$, or as a pure forward scattering event if $\frac{k_a + k_s}{\hat{k}} < r < \frac{k_a + k_s + k_n}{\hat{k}} = 1$ (fortune wheel).

This technique is well suited to the recent Monte Carlo developments toward flexible validation tools for accuracy control of fast radiation solvers (interacting with chemistry and fluid mechanics). In such contexts, field representation is bound to the specificity of each solver in an intricate manner and null-collision algorithms make it

possible to design transversal meshless² Monte Carlo codes that are immediately applicable whatever the retained solver numerics [Eymet *et al.*, 2013].

The present technical note addresses the question of using integral formulation techniques for refining Monte Carlo algorithms involving null-collisions. For didactic reasons, we first consider the academic question of evaluating the distribution function (at a given point in a given direction) in an heterogeneous emitting/absorbing infinite medium using a backward algorithm (Sec. D.3). The corresponding integral formulation is constructed step by step as a translation of the above described null-collision algorithm. This formulation is then modified so that the constraint $\hat{k} > k$ is relieved : negative values of the null-collision coefficient are accepted. This is practically very significant because \hat{k} must be chosen to match k as closely as possible (otherwise too many useless collisions are sampled), which is a delicate task when the constraint $\hat{k} > k$ is strict. This first technical proposition is synthesised in Sec. D.4, with the complete description of a Monte Carlo algorithm evaluating the local net-power density within a bounded, heterogeneous, multiple scattering and emitting/absorbing medium. A second technical proposition is made in Sec. D.5 : an integral formulation is constructed that helps clarify the significance of introducing null-collisions, in particular as far as convergence is concerned. This formulation indicates that the problem of sampling free paths in heterogeneous fields could be bypassed without introducing any null-collision concept, but sign alternations would appear that would be sources of statistical variance. It is then shown that the benefit of introducing null-collisions is to break this sign alternation. We therefore suggest to preserve the idea of introducing a \hat{k} field, but without imposing that free paths be sampled according to \hat{k} , or that the type of collision (absorption, true scattering or forward continuation) be sampled according to the respective proportions of k_a , k_s and $k_n = \hat{k} - k_a - k_s$. A wider class of Monte Carlo algorithms is therefore identified that could be explored for convergence enhancement.

D.3 Theoretical justification and extension to negative values of the null-collision coefficient

In the particular case of stationary radiation³ in a non-scattering infinite medium, the distribution function at location \mathbf{x} in the direction $\boldsymbol{\omega}$ takes the following integral form (solution of Eq. D.1) :

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} k_{a,\lambda} s_\lambda \exp\left(-\int_0^\lambda k_{a,\sigma} d\sigma\right) d\lambda \quad (\text{D.3})$$

2. "meshless" is here used to indicate that the Monte Carlo algorithm requires no volume discretization. Therefore, if the input fields of temperature and extinction coefficients are analytical (as in benchmarking exercises) no mesh is used at all. However, if the input fields are provided using a volume discretization and an interpolation procedure, the grid is rigorously respected. The idea is that the input fields can take any form and that the Monte Carlo algorithm introduces no mesh by itself.

3. Transient radiation would induce no specific theoretical difficulty, but it would make the integral formulation much heavier. The extinction coefficients would indeed be functions of time and time would itself depend on path-length.

Throughout this note, in all non-recursive integral formulations, the notations $k_{a,\alpha}$, $k_{s,\alpha}$, $k_{n,\alpha}$, \hat{k}_α , s_α and f_α^{eq} are used to represent $k_a(\mathbf{x} - \alpha\boldsymbol{\omega})$, $k_s(\mathbf{x} - \alpha\boldsymbol{\omega})$, $k_n(\mathbf{x} - \alpha\boldsymbol{\omega})$, $\hat{k}(\mathbf{x} - \alpha\boldsymbol{\omega})$, $s(\mathbf{x} - \alpha\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega})$ and $f^{eq}(\mathbf{x} - \alpha\boldsymbol{\omega})$ respectively, where α is any propagation distance along the line of sight. Standard backward Monte Carlo algorithms start from [Eq. D.3](#) and introduce the random variable Λ corresponding to the distribution of absorption free paths λ in the $-\boldsymbol{\omega}$ direction, of probability density $p_\Lambda(\lambda) = k_{a,\lambda} \exp\left(-\int_0^\lambda k_{a,\sigma} d\sigma\right)$, to get

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda s_\lambda \quad (\text{D.4})$$

$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ is then interpreted as the expectation of $s(\mathbf{x} - \Lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega})$ which leads to the Monte Carlo algorithm of [Fig. D.1](#). Even if one decides to make use of a null-collision

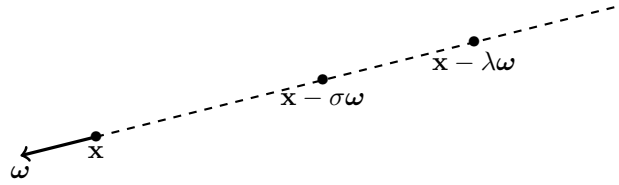
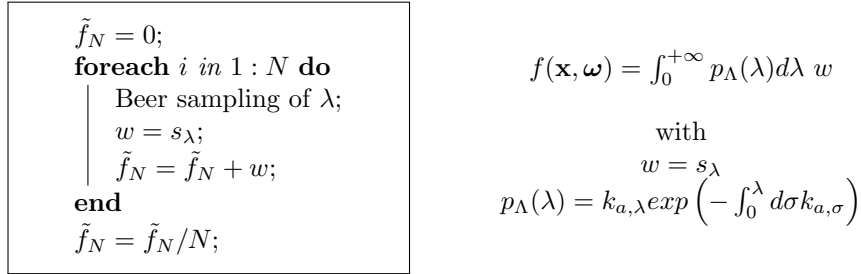


FIGURE D.1 – The reciprocal algorithm. \tilde{f}_N is a Monte Carlo estimate of $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ justified by [Eq. D.4](#). The integral formulation displayed on the right side of the algorithm box is a strict formal translation of the algorithm description.

technique, it does not appear explicitly in such a presentation : it is only implicit in the way the Beer sampling of λ is performed.

Alternatively, all the details of using null-collisions can be put forward as in the complete algorithm of the left part of [Fig. D.2](#). A strict formal translation of this algorithm is displayed on the right part of the figure, where the Heaviside notation $\mathcal{H}(\text{test})$ is used to represent 1 if *test* is true and 0 otherwise. This integral formulation can be derived from the following Fredholm equation, a well-known translation of the radiative transfer equation (here of [Eq. D.2](#) at stationary state, including null-collisions interpreted as forward scattering events) :

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} \exp\left(-\int_0^\lambda (k_{a,\sigma} + k_{n,\sigma}) d\sigma\right) \times \left[k_{a,\lambda} s_\lambda + k_{n\lambda} \int_{4\pi} \delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}') f(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \right] d\lambda \quad (\text{D.5})$$

```

 $\tilde{f}_N = 0;$ 
foreach  $i$  in  $1 : N$  do
   $j = 0; w = 0; \mathbf{x}_0 = \mathbf{x};$ 
   $abs = false;$ 
  while  $abs = false$  do
    Beer sampling of  $\lambda_j$ ;
    Uniform sampling of  $r_j$ ;
     $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega};$ 
    if  $r_j < \frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})}$  then
       $w = s(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega});$ 
       $\tilde{f}_N = \tilde{f}_N + w;$ 
       $abs = true;$ 
    end
     $j = j + 1;$ 
  end
end
 $\tilde{f}_N = \tilde{f}_N / N;$ 

```

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_0}(\lambda_0) d\lambda_0 \int_0^1 p_{R_0}(r_0) dr_0$$

$$\left\{ \mathcal{H}\left(r_0 < \frac{k_a(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}(\mathbf{x}_1)}\right) w_1 + \mathcal{H}\left(r_0 > \frac{k_a(\mathbf{x}_1)}{\hat{k}(\mathbf{x}_1)}\right) \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_1}(\lambda_1) d\lambda_1 \int_0^1 p_{R_1}(r_1) dr_1 \right.$$

$$\left. \left\{ \mathcal{H}\left(r_1 < \frac{k_a(\mathbf{x}_2)}{\hat{k}(\mathbf{x}_2)}\right) w_2 + \mathcal{H}\left(r_1 > \frac{k_a(\mathbf{x}_2)}{\hat{k}(\mathbf{x}_2)}\right) \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_2}(\lambda_2) d\lambda_2 \int_0^1 p_{R_2}(r_2) dr_2 \right. \right.$$

$$\left. \dots \right\}$$

with

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}; \mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}$$

$$p_{\Lambda_j}(\lambda_j) = \hat{k}(\mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}) \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}) d\sigma_j\right)$$

$$p_{R_j}(r_j) = \frac{1}{1-0} = 1$$

$$w_j = s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega})$$

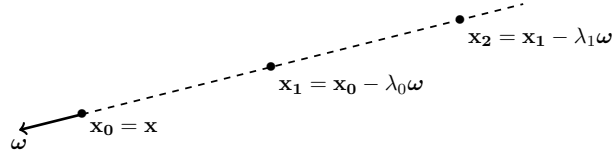


FIGURE D.2 – The standard null-collision algorithm. \tilde{f}_N is a Monte Carlo estimate of $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$. The integral formulation displayed on the right side of the algorithm box is a strict formal translation of the algorithm description. The Monte Carlo weight is w_j when the j -th collision is the first true collision (the preceding collisions are null-collisions). The whole algorithm could also be presented as in **Fig. D.1** with $\lambda = \lambda_0 + \lambda_1 + \dots + \lambda_{j-1}$, $\mathbf{x} - \lambda \boldsymbol{\omega} = \mathbf{x}_j$ and $s_\lambda = s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega})$, and the appropriate change of the coefficient k used in $p_\Lambda(\lambda)$.

We now give all the details of this derivation, justifying meanwhile the corresponding null-collision Monte-Carlo algorithm of [Fig. D.2](#) and we then extend it in order to allow negative values of the null-collision coefficient.

The first step is solving the Dirac integration and using the recursive notations $\mathbf{x}_0 \equiv \mathbf{x}$ and $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}$ to get

$$f(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}) d\sigma_j\right) \times \left[k_a(\mathbf{x}_{j+1}) s(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) + k_n(\mathbf{x}_{j+1}) f(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) \right] d\lambda_j \quad (\text{D.6})$$

Then, the probability density of the j^{th} free path is introduced :

$$p_{\Lambda_j}(\lambda_j) = \hat{k}(\mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}) \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}) d\sigma_j\right) \quad (\text{D.7})$$

as well as non-zero probabilities P_j , to give

$$f(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_j}(\lambda_j) d\lambda_j \left[P_{j+1} \left(\frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})} \frac{1}{P_{j+1}} s(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) \right) + (1 - P_{j+1}) \left(\frac{k_n(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})} \frac{1}{1 - P_{j+1}} f(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) \right) \right] \quad (\text{D.8})$$

and a simple recursive expansion gives

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_0}(\lambda_0) d\lambda_0 \left[P_1 w_1 + (1 - P_1) I_1 \right] \quad (\text{D.9})$$

with

$$I_j = \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_j}(\lambda_j) d\lambda_j \left[P_{j+1} w_{j+1} + (1 - P_{j+1}) I_{j+1} \right] \quad (\text{D.10})$$

and

$$w_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)} \frac{1}{P_j} s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) \prod_{m=1}^{j-1} \left(\frac{k_n(\mathbf{x}_m)}{\hat{k}(\mathbf{x}_m)} \frac{1}{1 - P_m} \right) \quad (\text{D.11})$$

[Eq. D.10](#) and [Eq. D.11](#) lead to the equation of [Fig. D.2](#) in a straightforward manner as soon as the choice $P_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)}$ is made. This is obviously only possible if $k_n > 0$, i.e. $k_a(\mathbf{x}_j) < \hat{k}(\mathbf{x}_j)$, which insures $P_j < 1$ and $1 - P_j > 0$. The usual restriction to positive null-collisions is therefore very much meaningful. However, the fact that \hat{k} must be a strict upper bound of the extinction coefficient k in standard null-collision algorithms is often a severe limitation of the technique. \hat{k} has to be chosen as a compromise between approaching k closely enough to avoid numerous expensive iterative null-collisions, and preserving enough simplicity to allow fast free paths sampling procedures. From this point of view, the constraint that \hat{k} must be strictly greater than k at all locations is a severe constraint. This is particularly true when the optical properties cannot be pre-computed across the field and are only

evaluated at each collision location, once it is sampled. This is a typical requirement of meshless algorithms. In such cases, there is no fundamental problem associated to the construction of a nonstrict upper-bound of k , for instance by only pre-computing k on a rough grid across the field, but it is very difficult to impose that this upper bound is strict considering that absorption and scattering coefficients are commonly non-monotonous functions of pressure, temperature and concentrations.

This difficulty can however be bypassed as soon as one observes that the choice of P_j in Eq. D.9 - D.11 is not constrained : $P_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)}$ is systematically used in the literature only because of its intuitive nature, in relation to the kinetic pictures of null-collisions. An alternative knowledgeable choice is :

$$P_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{k_a(\mathbf{x}_j) + |\hat{k}(\mathbf{x}_j) - k_a(\mathbf{x}_j)|} \quad (\text{D.12})$$

The immediate benefit is that we get rid of the constraint $k_n > 0$ (i.e. $\hat{k} = k_a + k_n$ is an upper bound of k_a) : *negative values of the null-collision coefficient are now admitted*. Furthermore, this choice is consistent with the results presented above since using P_j of Eq. D.12 leads to :

- the very same algorithm in cases when \hat{k} is a strict upper bound of k_a
- a legible extension of the algorithm otherwise, which bypasses the difficulties encountered when $k_a > \hat{k}$.

The resulting algorithm is fully described in Fig. D.3 and its extension to multiple

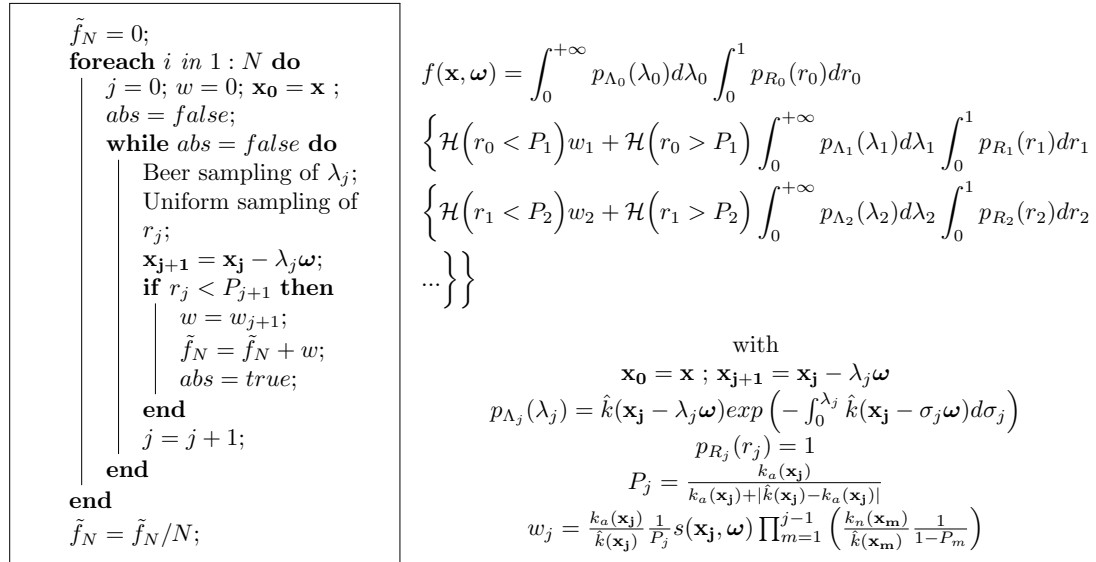


FIGURE D.3 – The generalized null-collision algorithm in which there is no more constraint on the \hat{k} field. \tilde{f}_N is a Monte Carlo estimate of $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ justified by Eq. D.9. The integral formulation displayed on the right side of the algorithm box is a strict formal translation of the algorithm description. Note that when k_n is always positive, $P_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)}$, $\frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)} \frac{1}{P_j} = 1$ and $\frac{k_n(\mathbf{x}_m)}{\hat{k}(\mathbf{x}_m)} \frac{1}{1 - P_m} = 1$; the algorithm becomes identical to that of Fig. D.2.

scattering in confined geometries is provided in the following section. One of its

important features is that the Monte Carlo weight of Eq. D.11 can take negative values : $\frac{k_n}{k}$ is negative each time k_n is negative. So the proposed algorithm deals rigorously with the occurrence of unexpected negative values of the null-collision coefficient, but this is achieved at the price of increasing the weight-variance, therefore lowering the convergence rate. This is quantitatively examined in the following section.

D.4 Practical implementation

The algorithm described in this section evaluates the stationary net-power density $A(\mathbf{x})$ at a location \mathbf{x} within the volume, i.e. the balance between the radiative power absorbed and the radiative power emitted locally, per unit volume :

$$A(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} h\nu c k_a(\mathbf{x}) [f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) - s(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})] d\boldsymbol{\omega} \quad (\text{D.13})$$

We restrict ourselves to thermal emission under the assumption of local thermodynamic equilibrium. Therefore $s(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = f^{eq}(\mathbf{x})$ and

$$A(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} h\nu c k_a(\mathbf{x}) [f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) - f^{eq}(\mathbf{x})] d\boldsymbol{\omega} \quad (\text{D.14})$$

If the volume were still non-scattering and infinite as in Sec. D.3, $A(\mathbf{x})$ could be evaluated using an algorithm very similar to that of Eq. D.9, Eq. D.10 and Eq. D.11 (see also Fig. D.3). The only change would be that $\boldsymbol{\omega}$ would be first sampled according to an isotropic probability density function $p_{\Omega}(\boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{4\pi}$, and the Monte Carlo weight w_j would be modified by multiplying it by $4\pi h\nu c k_a(\mathbf{x})$ and replacing $f^{eq}(\mathbf{x}_j)$ by $f^{eq}(\mathbf{x}_j) - f^{eq}(\mathbf{x})$. Eq. D.9, Eq. D.10 and Eq. D.11 would then become

$$A(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} p_{\Omega}(\boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_0}(\lambda_0) d\lambda_0 \left[P_1 w_1 + (1 - P_1) I_1 \right] \quad (\text{D.15})$$

$$I_j = \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_j}(\lambda_j) d\lambda_j \left[P_{j+1} w_{j+1} + (1 - P_{j+1}) I_{j+1} \right] \quad (\text{D.16})$$

$$w_j = 4\pi h\nu c k_a(\mathbf{x}) \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)} \frac{1}{P_j} (f^{eq}(\mathbf{x}_j) - f^{eq}(\mathbf{x})) \prod_{m=1}^{j-1} \left(\frac{k_n(\mathbf{x}_m)}{\hat{k}(\mathbf{x}_m)} \frac{1}{1 - P_m} \right) \quad (\text{D.17})$$

Introducing multiple scattering can be performed by adding a branch to the collision test, and sampling a new direction when true scattering occurs. When dealing with opaque boundaries a test is added to check if a boundary is intersected before the next collision, in which case a new binary sampling procedure is implemented to either resume the algorithm, with a new sampled reflection direction, or stop the algorithm and compute the Monte Carlo weight using the value of the equilibrium distribution function at the surface impact. Altogether, the resulting algorithm is a quite standard backward Monte Carlo algorithm corresponding to the following

recursive formulation :

$$A(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} p_{\Omega}(\boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_0}(\lambda_0) d\lambda_0 \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_1 \in \mathcal{B}) \left\{ \begin{array}{l} P_{E,1} w_1 \\ + (1 - P_{E,1}) \int_{2\pi} p_R(\boldsymbol{\omega}_0 | \boldsymbol{\omega}_1, \mathbf{x}_1) d\boldsymbol{\omega}_1 I_1 \end{array} \right\} + \\ \mathcal{H}(\mathbf{x}_1 \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} P_{A,1} w_1 \\ + P_{S,1} \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_0 | \boldsymbol{\omega}_1, \mathbf{x}_1) d\boldsymbol{\omega}_1 I_1 \\ + P_{N,1} \int_{4\pi} \delta(\boldsymbol{\omega}_0 - \boldsymbol{\omega}_1, \mathbf{x}_1) d\boldsymbol{\omega}_1 I_1 \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (\text{D.18})$$

$$I_j = \int_0^{+\infty} p_{\Lambda_j}(\lambda_j) d\lambda_j \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{B}) \left\{ \begin{array}{l} P_{E,j+1} w_{j+1} \\ + (1 - P_{E,j+1}) \int_{2\pi} p_R(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} I_{j+1} \end{array} \right\} + \\ \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} P_{A,j+1} w_{j+1} \\ + P_{S,j+1} \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} I_{j+1} \\ + P_{N,j+1} \int_{4\pi} \delta(\boldsymbol{\omega}_j - \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} I_{j+1} \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (\text{D.19})$$

$$w_j = 4\pi h\nu c k_a(\mathbf{x}) \times \left[\mathcal{H}(\gamma_j=1) \frac{\varepsilon(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_{j-1})}{P_{E,j}} (f^{eq}(\mathbf{x}_j) - f^{eq}(\mathbf{x})) + \mathcal{H}(\gamma_j=3) \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j) P_{A,j}} (f^{eq}(\mathbf{x}_j) - f^{eq}(\mathbf{x})) \right] \times \prod_{m=1}^{j-1} \left[\mathcal{H}(\gamma_m=2) \frac{1 - \varepsilon(\mathbf{x}_m, \boldsymbol{\omega}_{m-1})}{1 - P_{E,m}} + \mathcal{H}(\gamma_m=4) \frac{k_s(\mathbf{x}_m)}{\hat{k}(\mathbf{x}_m) P_{S,m}} + \mathcal{H}(\gamma_m=5) \frac{k_n(\mathbf{x}_m)}{\hat{k}(\mathbf{x}_m) P_{N,j}} \right] \quad (\text{D.20})$$

where \mathcal{V} is the volume of the considered system and \mathcal{B} its boundary (Fig. D.4). The locations \mathbf{x}_{j+1} and directions $\boldsymbol{\omega}_j$ are defined in the same way as in Sec. D.3 with the only difference that $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{y}_{j+1}$ when $\mathbf{x}_j - \lambda \boldsymbol{\omega}_j$ is outside \mathcal{V} , where \mathbf{y}_{j+1} is the intersection with the boundary of the straight ray starting at \mathbf{x}_j in the direction $-\boldsymbol{\omega}_j$ (see Fig. D.4). When \mathbf{x}_j belongs to \mathcal{B} , $\varepsilon(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_{j-1})$ is the local value of the emissivity in the direction $\boldsymbol{\omega}_{j-1}$, and $p_R(\boldsymbol{\omega}_{j-1} | \boldsymbol{\omega}_j, \mathbf{x}_j)$ is the probability density of the reflection direction $\boldsymbol{\omega}_{j-1}$ for an incidence along $\boldsymbol{\omega}_j$. In the absence of any specific convergence difficulty, the branching probability $P_{E,j}$ (the probability that the algorithm stops at the surface impact \mathbf{x}_j) can be taken as $P_{E,j} = \varepsilon(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_{j-1})$. In the expression of the weight, $\gamma_j = 1$ if the algorithm stops at the boundary, $\gamma_j = 2$ if the optical path sampling is continued backward after surface reflection, $\gamma_j = 3$ in case of "absorption" within the volume, $\gamma_j = 4$ in case of true scattering and $\gamma_j = 5$ in case of null-collision. The true originalities are the definition of the branching probabilities $P_{A,j}$, $P_{S,j}$ and $P_{N,j}$ when \mathbf{x}_j belongs to \mathcal{V} (probabilities that the j -th collision is an absorption, a true-scattering event, or a null-collision respectively), as well as

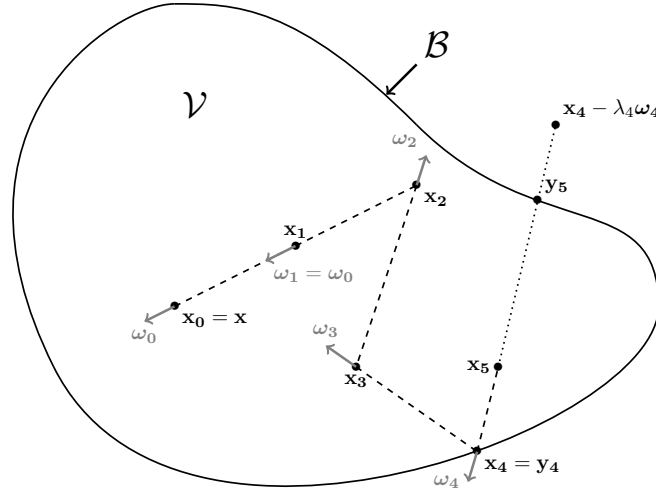


FIGURE D.4 – \mathbf{y}_{j+1} is the intersection with the boundary of the straight ray starting at \mathbf{x}_j in the direction $-\boldsymbol{\omega}_j$. \mathbf{x}_{j+1} equals $\mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}_j$ if this location belongs to \mathcal{V} . Otherwise $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{y}_{j+1}$. If $\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}$ the collision is either a null-collision and $\boldsymbol{\omega}_{j+1} = \boldsymbol{\omega}_j$ (see $j = 0$ in the figure), or a true scattering and $\boldsymbol{\omega}_{j+1}$ is sampled according to the single scattering phase function (see $j = 1$ and $j = 2$ in the figure), or an "absorption" and the algorithm stops (the exchange weight is computed, see $j = 4$ in the figure). If $\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{B}$ the interaction with the boundary is either a reflection and $\boldsymbol{\omega}_{j+1}$ is sampled according to the directional reflectivity (see $j = 3$ in the figure), or an "absorption" and the algorithm stops (the exchange weight is computed).

the Monte Carlo weight expressions. As argued in [Sec. D.3](#), we suggest the use of $P_{A,j} = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{k_a(\mathbf{x}_j) + k_s(\mathbf{x}_j) + |k_n(\mathbf{x}_j)|}$, $P_{S,j} = \frac{k_s(\mathbf{x}_j)}{k_a(\mathbf{x}_j) + k_s(\mathbf{x}_j) + |k_n(\mathbf{x}_j)|}$ and $P_{N,j} = \frac{|k_n(\mathbf{x}_j)|}{k_a(\mathbf{x}_j) + k_s(\mathbf{x}_j) + |k_n(\mathbf{x}_j)|}$. Except for that, the algorithmic structure strictly corresponds to the application of Skullerud and Woodcock's strategies. Note however that although we essentially play with probability choices, our proposition is nothing like an importance sampling strategy. As detailed at the end of [Sec. D.3](#), we do not propose to modify the branching probabilities and change the Monte-Carlo weight accordingly; we rather extend the applicability range of standard null-collision algorithms by preserving exactly the definitions of $P_{A,j}$, $P_{S,j}$ and $P_{N,j}$ in the usual range, and generalizing their definitions in order to handle rigorously the occurrences of $\hat{k} < k_a$.

We now present a parametric study in order to evaluate the numerical behaviour of the above presented algorithm. Monochromatic radiative budget densities are evaluated at two locations within a simple academic configuration. The algorithmic implementation is validated against a well mastered Monte Carlo algorithm, and the code is then used to analyse how the convergence levels and the computation times depend on the retained \hat{k} field. The considered system is a cube, of side $2L$, with $0K$ diffuse-reflecting faces of uniform emissivity ε , that are perpendicular to the x , y and z axis of a Cartesian coordinate system originating at the center of the cube (see [Fig. D.5](#)). The enclosed medium is heterogeneous both in temperature and optical properties. The k_a , k_s and f^{eq} fields are

$$k_a(x, y, z) = k_{a,max} \left(\frac{L-x}{2L} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2 + z^2}{2L^2}} \right), \quad (\text{D.21})$$

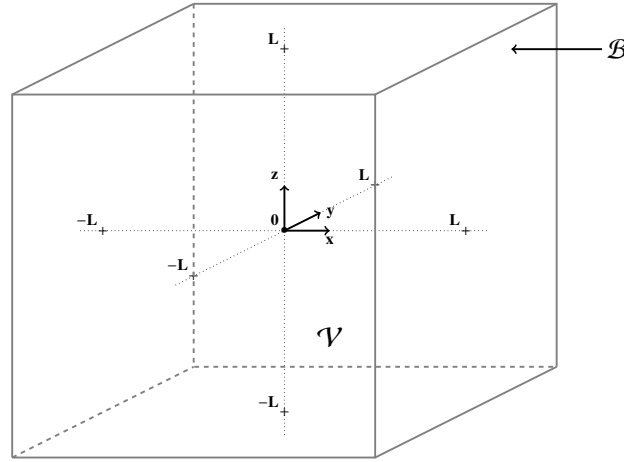


FIGURE D.5 – Considered system : a cube of side $2L$, whose center is the Cartesian coordinate system origin.

$$k_s(x, y, z) = k_s(x, y, z) = k_{s,max} \left(\frac{L-x}{2L} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2 + z^2}{2L^2}} \right) \quad (\text{D.22})$$

and

$$f^{eq}(x, y, z) = f_{max}^{eq} \left(\frac{L-x}{2L} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2 + z^2}{2L^2}} \right) \quad (\text{D.23})$$

figuring an axisymmetric flame along the x axis (maximum temperature and maximum extinction along the axis, and a linear decay as function of the distance to the axis, down to zero at the corners). The Henyey-Greenstein single-scattering phase function is used with a uniform value of the asymmetry parameter g throughout the field. For simplicity, \hat{k} is chosen uniform. As k_a and k_s take their maximum values at the same location, $k_{max} = k_{a,max} + k_{s,max}$ is the maximum value of the total extinction coefficient and the ratio $\rho = \frac{\hat{k}}{k_{max}}$ tells us whether negative values of the null-collision coefficient will occur ($\rho < 1$) or not. Because of the shape of the retained field of equilibrium distribution function, monochromatic radiative budgets are simply proportional to f_{max}^{eq} and the remaining numerically-meaningful free-parameters are (in nondimensional form) : ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$, g and ε . The analysis will be performed using $g = 0$ (isotropic scattering) and $\varepsilon = 1$ (black boundaries). The influence of g , ε , as far as numerical behaviour is concerned, will then be briefly described at the end of the section.

Tab. D.1 displays the simulated values of $A(\mathbf{x})$ for $\mathbf{x} = [0, 0, 0]$ (the center of the cube) and $\mathbf{x} = [-L, 0, 0]$ (the location of the maximum values of the k_a , k_s and f^{eq} fields), using 10^6 independant realizations, for $\rho = 1$, meaning that $k_n = 0$ at $\mathbf{x} = [-L, 0, 0]$ and $k_n > 0$ at all other locations (no negative values of the null-collision coefficient). Also given are the associated standard deviations, σ , and computation times, t . The columns labelled A_{ref} and σ_{ref} correspond to the simulation results obtained with a standard Monte Carlo algorithm in which the problem of inverting optical thicknesses is solved by fitting $k = k_a + k_s$ using an accurate spline decomposition. These solutions were only used to validate the implementation

procedure : considering the values of σ and σ_{ref} , A and A_{ref} are indeed statistically compatible. The relative uncertainty $\frac{\sigma}{A}$ indicates that the convergence level is good for all the considered absorption and scattering optical thicknesses ($\frac{\sigma}{A}$ is below 0.2% in all cases). The computation times, that were measured without the use of any parallelization procedure, are typical of standard Monte Carlo simulations.

More open is the question of choosing \hat{k} , in particular the effect of modifying the Monte Carlo weight in order to deal with negative values of the null-collision coefficient when $\hat{k} < k$ at some locations. This question is addressed by reproducing the same simulations for different values of ρ , from $\rho = 0.5$ (i.e. \hat{k} is a faulty overestimate of k , as low as $\frac{1}{2}k$ at some locations) to $\rho = 5$ (on the contrary \hat{k} is a large overestimate of k). **Fig. D.6** displays the evolution with ρ of $\frac{\sigma}{A}$, **Fig. D.7** displays the computation times, and **Fig. D.8** displays the computation times required to achieved a 1% accuracy. These results are interpreted as follows :

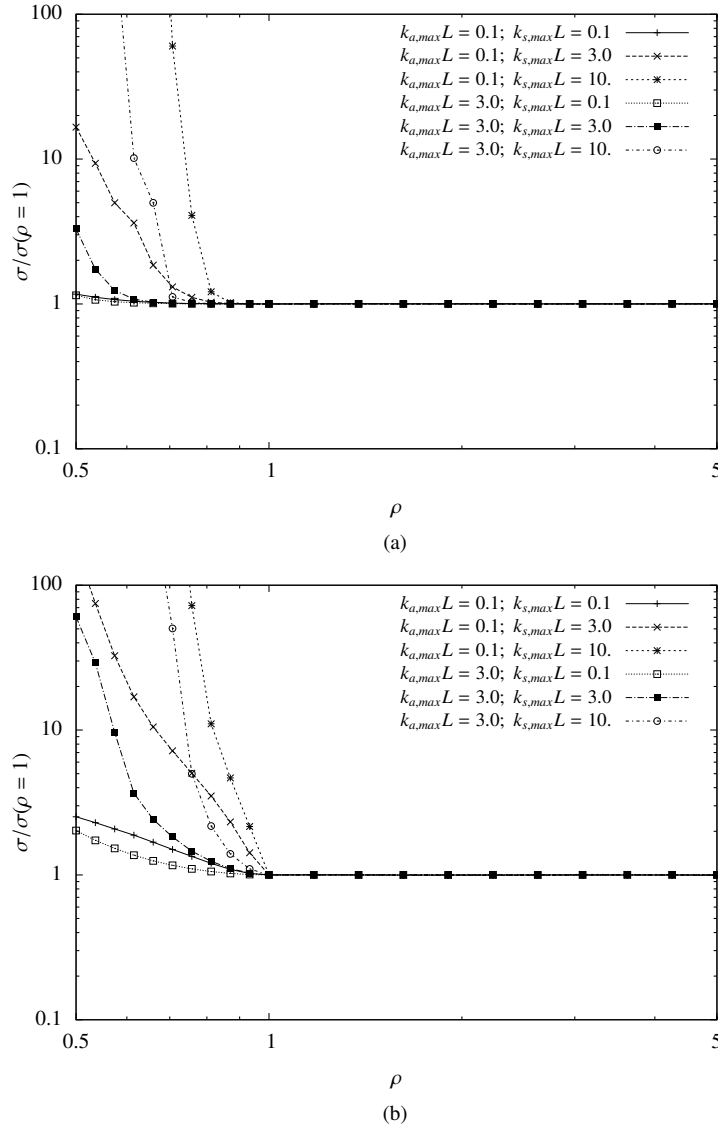


FIGURE D.6 – Standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at (a) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ and (b) $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$

$k_{a,max}L$	$k_{s,max}L$	$\frac{A}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$	t(s)	$\frac{A_{ref}}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$	$\frac{\sigma_{ref}}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$
0.1	0.1	-0.483813	8.52E-05	2.43	-0.483717	1.13E-05
0.1	1	-0.482031	8.97E-05	7.92	-0.481921	1.40E-05
0.1	3	-0.477997	9.90E-05	24.25	-0.477883	1.93E-05
0.1	10	-0.463027	1.27E-04	122.69	-0.463068	3.56E-05
1	0.1	-0.366086	2.09E-04	2.94	-0.365971	7.96E-05
1	1	-0.356169	2.13E-04	7.43	-0.356353	8.93E-05
1	3	-0.33585	2.20E-04	19.2	-0.335928	1.06E-04
1	10	-0.277205	2.28E-04	76.39	-0.27683	1.34E-04
3	0.1	-0.218989	2.21E-04	3.48	-0.218942	1.23E-04
3	1	-0.209261	2.18E-04	6.4	-0.209529	1.26E-04
3	3	-0.190256	2.10E-04	13.63	-0.190141	1.30E-04
3	10	-0.144073	1.84E-04	41.38	-0.143501	1.27E-04
10	0.1	-0.071271	1.19E-04	3.49	-0.07137	9.15E-05
10	1	-0.068662	1.15E-04	4.66	-0.068854	8.99E-05
10	3	-0.063501	1.07E-04	7.29	-0.063369	8.61E-05
10	10	-0.050674	8.49E-05	16.23	-0.050674	7.44E-05

(A)

$k_{a,max}L$	$k_{s,max}L$	$\frac{A}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$	t(s)	$\frac{A_{ref}}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$	$\frac{\sigma_{ref}}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{eq}}$
0.1	0.1	-0.977296	1.27E-04	2.24	-0.977336	2.58E-05
0.1	1	-0.97683	1.29E-04	6.18	-0.976679	2.79E-05
0.1	3	-0.975682	1.33E-04	15.3	-0.975767	3.22E-05
0.1	10	-0.974828	1.37E-04	44.9	-0.974733	4.36E-05
1	0.1	-0.822495	3.24E-04	2.38	-0.822111	1.97E-04
1	1	-0.822446	3.26E-04	5.13	-0.821846	2.03E-04
1	3	-0.823933	3.29E-04	10.75	-0.823994	2.14E-04
1	10	-0.83941	3.27E-04	26.32	-0.839533	2.29E-04
3	0.1	-0.658358	4.07E-04	2.22	-0.657242	3.64E-04
3	1	-0.66479	4.09E-04	3.73	-0.664704	3.62E-04
3	3	-0.67959	4.12E-04	6.67	-0.679703	3.58E-04
3	10	-0.72422	4.10E-04	14.49	-0.722886	3.42E-04
10	0.1	-0.544282	4.62E-04	1.98	-0.5438	4.60E-04
10	1	-0.551703	4.63E-04	2.47	-0.551153	4.57E-04
10	3	-0.567704	4.65E-04	3.54	-0.567366	4.48E-04
10	10	-0.61077	4.65E-04	6.76	-0.609865	4.27E-04

(B)

TABLE D.1 – Estimation, standard deviation and computation time obtained for 10^6 independant realizations and for $\rho = 1$ at two probe locations : $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ (see table (A)) and $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$ (see table (B)) for several values of the optical thicknesses $k_{a,max}L$ and $k_{s,max}L$. The computation was done with a processor "Intel Core i5 - 2,4GHz" without any parallelization.

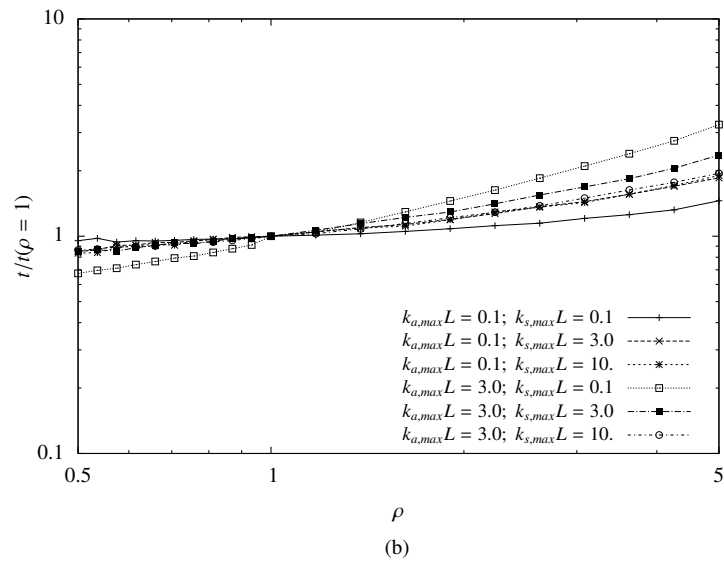
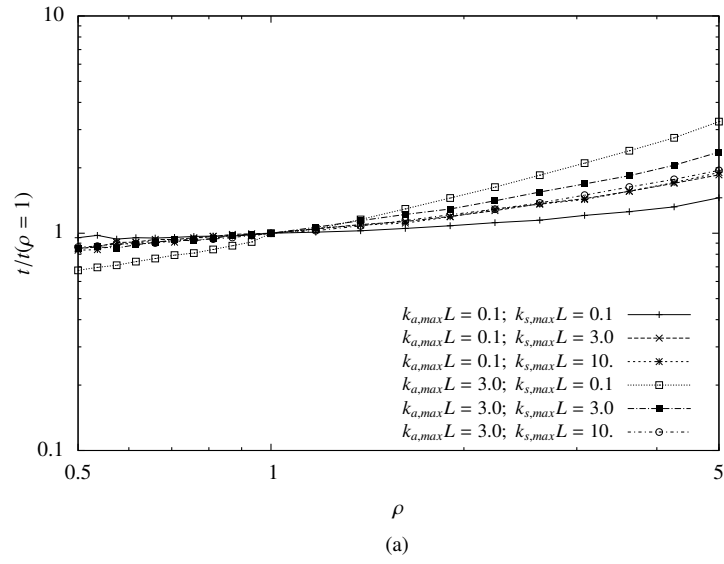


FIGURE D.7 – Computation time as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at (a) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ and (b) $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$

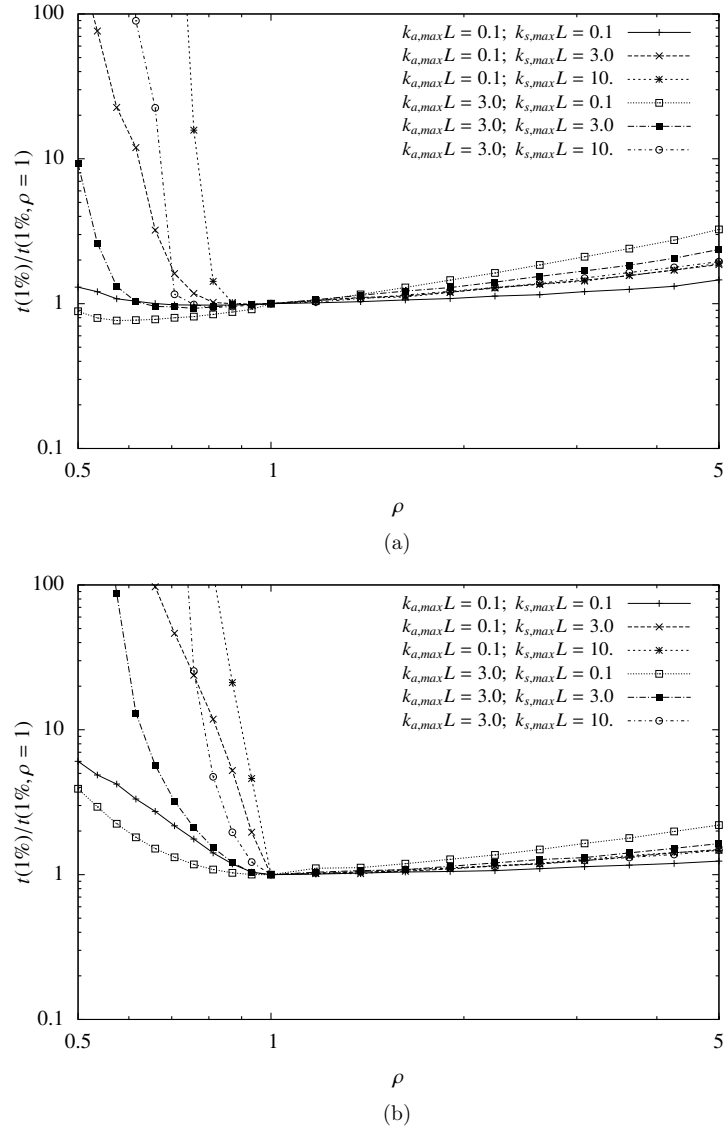


FIGURE D.8 – Computation time in order to reach a 1% standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at (a) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ and (b) $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$

- Above $\rho = 1$, the standard deviation of the estimator is independent of ρ . This is expected since no negative values of the null-collision coefficient occur : as indicated from the start, standard null-collision algorithms can be rigorously interpreted as only practical ways to sample collision-locations according to Beer extinction. Adding supplementary null-collisions increases only the computation time but changes nothing to the resulting sampling statistics.
- Below $\rho = 1$, the standard deviation of the estimator increases when increasing the occurrence of negative values of the null-collision coefficient. Again, this is expected since the handling of negative values of the null-collision coefficient is achieved at the price of multiplying the Monte Carlo weight by the correction term $^4 - \frac{\hat{k} + 2|k_n|}{\hat{k}}$. The module of this weight-correction factor is always greater than unity and the factor is positive when absorption or true scattering is retained, negative when null-collision is retained. If many scattering or null-collision events occur along the optical path, in regions where $k_n < 0$, before the algorithm stops because of absorption, then the Monte Carlo weight can take very high absolute values as it involves the product of a large number or correction terms greater than unity. The convergence toward the exact same solution of the radiative transfer equation is insured by the fact that positive weights are compensated by negative ones, but the convergence rate is smaller : much more statistical realisations are required to reach the same accuracy levels when no negative values of the null-collision coefficient occur. This is illustrated by the fact that for increasing values of the scattering optical thickness combined with high values of the single-scattering albedo (see $k_s L = 3$ and $k_a L = 0.1$ in Fig. D.6), the standard deviation increases very fast when decreasing ρ below unity. This effect is of course much stronger when \mathbf{x} is right at the center of the region where $k_n < 0$ (see $\mathbf{x} = [-L, 0, 0]$) than when optical paths starts from a region where $k_n > 0$ (see $\mathbf{x} = [0, 0, 0]$).
- For a given number of statistical realisations, the computation times (see Fig. D.7) decrease when decreasing the number of null-collisions, and this is also true when decreasing k_n below zero. This is a direct result of less collisions occurring, but this does not wholly compensate the degradation in standard deviation (see Fig. D.8). For a given relative accuracy, the required computation time is then driven by the impact of ρ upon the standard deviation, and it is of course greater as \hat{k} becomes a larger and larger overestimate of the true extinction coefficient.

Altogether, the use of negative values of the null-collision coefficient is fully relevant when the approximated upper-bound \hat{k} can be astutely designed, since the convergence will be really reasonable : for $\hat{k} \simeq 0.9k$, the increase of the computing effort should not be a concern (see Fig. D.8 (a)) except if domains where $k_n < 0$ are optically thick with a high single scattering albedo (see Fig. D.8 (b)). Accordingly, most efforts design of \hat{k} should focus on avoiding the occurrences of such domains. Bad approximates of the upper-bound ($\rho < 1$) would yield pathological behaviours, as expected.

4. With the choices we made for P_A , P_S and P_N , the correction terms in the weight expression of Eq. D.17 verify the property $\frac{k_a}{\hat{k}P_A} = \frac{k_s}{\hat{k}P_S} = \left| \frac{k_n}{\hat{k}P_N} \right| = \frac{\hat{k} + 2|k_n|}{\hat{k}}$

The simulations performed with $g \neq 0$ and $\varepsilon < 1$ indicate that the shape of the single scattering phase function has very little influence (the values of A are affected but the numerical behaviour is unchanged), and that surface reflection acts like scattering : because of multiple reflections, more null-collision or scattering events can occur within the domain of negative null-collision coefficients before absorption and standard deviation increases (although less than when increasing scattering).

D.5 Formal developments

This section is addressed to the reader interested by the formal significance of null-collision algorithms. The physical meaning of null-collisions at the kinetic level is quite trivial : they are additional collisions that change nothing to the overall radiative transfer. But when looking at the corresponding integral formulations, several observations can be made, that could be useful in the process of enhancing statistical convergence. A renewed viewpoint can indeed be taken from which null-collisions are only of secondary importance compared to the associated integral reformulation. This reformulation alone suppresses the need for an optical-thickness inversion procedure and meshless algorithms can therefore be designed without introducing any null-collision. The next paragraph, entitled *step 1*, illustrates this point. In *step 2* we argue that it may still be useful to introduce a (non-strict) overestimate \hat{k} of the extinction coefficient, but \hat{k} is not used for sampling collision locations : it plays a role similar to that of a control variate [Hammersley *et al.*, 1965], allowing to get rid of sign alternations that would otherwise be sources of convergence difficulties. In *step 3* we finally show how standard null-collision algorithms can be fully recovered by choosing to also make use of \hat{k} for free-path sampling as well as for the weighting of branching tests. We advise however that this choice does not entail optimized convergence features.

Step 1 - Our starting point is the observation that the initial radiative transfer equation of Eq. D.1 at stationary state can be integrated backward along the line of sight to give the following Fredholm equation :

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = f(\mathbf{x} - L\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) + \int_0^L [k_{a,\lambda}s_\lambda - k_{a,\lambda}f(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega})] d\lambda \quad (\text{D.24})$$

This equation is easy to demonstrate but its structure does not highlight the pictures of transport physics, which is probably the reason why it is seldom mentioned in the radiative transfer literature. Indeed, by comparison with Eq. D.3, no Beer extinction appears and it is difficult to interpret physically the integration over space of the local emission $k_{a,\lambda}s_\lambda$. Of course, the exponentials are well recovered due to the Fredholm structure of this equation (f appearing within the integral). Fredholm equations are common in photon transport physics but it is worth mentioning that they are usually the result of scattering or surface-reflection representations. In the present context the fact that Beer extinction does not appear explicitly is a strong advantage : the difficulties associated with the inversion of exponential extinctions in heterogeneous media are automatically by-passed. Let us consider the particular

case where $f(\mathbf{x} - L\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) = 0$. The same steps can then be followed as in [Eq. D.6](#) and [Eq. D.8](#), starting from [Eq. D.24](#) instead of [Eq. D.5](#), to give :

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{L_0} p_{\Lambda_0}(\lambda_0) d\lambda_0 \left[P_1 w_1 + (1 - P_1) I_1 \right] \quad (\text{D.25})$$

with

$$I_j = \int_0^{L_j} p_{\Lambda_j}(\lambda_j) d\lambda_j \left[P_{j+1} w_{j+1} + (1 - P_{j+1}) I_{j+1} \right] \quad (\text{D.26})$$

where the only changes by comparison with [Eq. D.9](#) and [Eq. D.10](#) are that the j -th free path is integrated between zero and $L_j = L - \sum_{m=0}^{j-1} \lambda_j$, the probability density function $p_{\Lambda_j}(\lambda_j)$ is now an arbitrary probability density on $[0, L_j]$, and the Monte Carlo weights are

$$w_j = k_a(\mathbf{x}_j) s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) \frac{1}{P_j} \frac{1}{p_{\Lambda_{j-1}}(\lambda_{j-1})} \prod_{m=1}^{j-1} \left[-k_a(\mathbf{x}_m) \frac{1}{1 - P_m} \frac{1}{p_{\Lambda_{m-1}}(\lambda_{m-1})} \right] \quad (\text{D.27})$$

Apart from the free paths being integrated over finite intervals, which we will comment later, the essential differences with the null-collision algorithm of section 2 are that no \hat{k} field has yet been introduced and that the successive weights alternate signs ($w_1 > 0$; $w_2 < 0$; ...). In *step 2* we argue that *the first meaning and the main interest of introducing \hat{k} is to break this sign alternation.*

Step 2 - As detailed in the literature about exponential transforms [[Sarkar et Prasad, 1979](#), [Turner et Larsen, 1997a](#), [Turner et Larsen, 1997b](#)], it is shown in [Sec. D.6.2](#) that any arbitrary positive scalar field \hat{k} can be introduced to transform [Eq. D.24](#) into

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = f(\mathbf{x} - L\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) \exp \left(- \int_0^L \hat{k}_\lambda d\lambda \right) + \int_0^L \exp \left(- \int_0^\lambda d\sigma \hat{k}_\sigma \right) \left[k_{a,\lambda} s_\lambda + (\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}) f(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) \right] d\lambda \quad (\text{D.28})$$

Very much like when introducing control variates to modify the convergence features of Monte Carlo algorithms [[Hammersley et al., 1965](#)], we can play with the arbitrary choice of the \hat{k} field :

- First, if $\hat{k} > 0$ the exponentials insure that improper integrals converge and L may be extended to infinity to recover the same problem as in [Sec. D.3](#) : evaluating $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ in the particular case of an infinite medium. [Eq. D.28](#) becomes

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} \exp \left(- \int_0^\lambda \hat{k}_\sigma d\sigma \right) \left[k_{a,\lambda} s_\lambda + (\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}) f(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) \right] d\lambda \quad (\text{D.29})$$

which is [Eq. D.5](#) exactly, where the Dirac integration is solved (there is indeed no more need to highlight the physical picture of a forward scattering equivalent). Note that we only take the limit $L \rightarrow +\infty$ for didactic reasons and that all

further reasoning can be reproduced using Eq. D.28 to address the question of evaluating $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ in bounded domains. For instance, the term $f(\mathbf{x} - L\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) \exp\left(-\int_0^L \hat{k}_\lambda d\lambda\right)$ in Eq. D.28 is the one that allows the representation of surface emission and surface reflection in Sec. D.4.

- Second, as in Sec. D.3, \hat{k} can be lower than k_a . But, as much as possible, \hat{k} should still be chosen such that $\hat{k} > k_a$ at most locations. Indeed this ensures that both $k_{a,\lambda}s_\lambda$ and $(\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda})f(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}')$ in Eq. D.29 are positive terms, with the direct consequence that Monte Carlo weights are strictly positive : the convergence difficulties due to sign alternation vanish. The technical steps of Eq. D.6 and Eq. D.8 can again be taken, this time to recover Eq. D.9 and Eq. D.10 exactly, with the following new expression for w_j (which is strictly positive if $\hat{k} - k_a > 0$) :

$$w_j = k_a(\mathbf{x}_j) \exp\left(-\int_0^{\lambda_{j-1}} \hat{k}(\mathbf{x}_{j-1} - \sigma\boldsymbol{\omega}) d\sigma\right) s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) \frac{1}{P_j} \frac{1}{p_{\Lambda_{j-1}}(\lambda_{j-1})} \times$$

$$\prod_{m=1}^{j-1} \left[\left(\hat{k}(\mathbf{x}_m) - k_a(\mathbf{x}_m) \right) \exp\left(-\int_0^{\lambda_{m-1}} \hat{k}(\mathbf{x}_{m-1} - \sigma\boldsymbol{\omega}) d\sigma\right) \frac{1}{1 - P_m} \frac{1}{p_{\Lambda_{m-1}}(\lambda_{m-1})} \right] \quad (\text{D.30})$$

where the $p_{\Lambda_j}(\lambda_j)$ probability densities and the P_j probabilities are now fully arbitrary [Hammersley *et al.*, 1965, De La Torre *et al.*, 2014]. Note in particular that \hat{k} appears in the weight expression, but that p_{Λ_j} and P_j can be chosen independently of \hat{k} .

- Third, choosing \hat{k} as close to k_a as possible is useful, this time not as far as statistical convergence is concerned, but in terms of computational costs. Let us indeed admit that p_{Λ_j} and P_j could be ideally chosen according to a zero-variance strategy [De La Torre *et al.*, 2014, Dauchet, 2012, Assaraf et Caffarel, 1999, Hoogenboom, 2008]. If we temporary admit that \hat{k} is strictly greater than k_a at all locations, then zero-variance is obtained with

$$p_{\Lambda_j}(\lambda_j) = \frac{1}{f(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega})} \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma\boldsymbol{\omega}) d\sigma\right) \times$$

$$\left[k_a(\mathbf{x}_{j+1}) s(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) + \left(\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) - k_a(\mathbf{x}_{j+1}) \right) f(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) \right] \quad (\text{D.31})$$

and

$$P_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j) s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega})}{k_a(\mathbf{x}_j) s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) + \left(\hat{k}(\mathbf{x}_j) - k_a(\mathbf{x}_j) \right) f(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega})} \quad (\text{D.32})$$

(see Sec. D.6.3). Then only one sample is required to reach the exact solution and the remaining question is the computation cost of the sampling procedure itself. This cost is directly related to the average value of the recursion level : the value of the index j at which the sampling algorithm is exited. This average recursion level is obviously related to the value of P_j : there is ideally no recursion when $P_j = 1$, which is reached when \hat{k} is strictly identical to k_a . Altogether, our conclusions match those of all previous publications : \hat{k} should

be greater than k_a and should be as close to k_a as possible. However, we reach these conclusions without any reference to \hat{k} as an extinction coefficient to be used for the sampling of collision locations. So, not only the constraint $\hat{k} > k_a$ becomes non-strict (as illustrated in the previous sections), but it is also no more required that the function $\hat{\tau}(\lambda) = \int_0^\lambda \hat{k}(\mathbf{x} - \sigma\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}, t + \frac{\sigma}{c}) d\sigma$ be analytically invertible : all we need is that $\hat{\tau}(\lambda)$ be easily evaluated as it appears within the exponentials in the weight expression of [Eq. D.30](#).

Step 3 - To recover the standard null-collision algorithm of [Sec. D.3](#) (before extension to negative k_n values), it suffices to make the following choice for p_{Λ_j} and P_j (that were arbitrary up to now) :

$$p_{\Lambda_j}(\lambda_j) = \hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma\boldsymbol{\omega}) d\sigma\right) \quad (\text{D.33})$$

and

$$P_j = \frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)} \quad (\text{D.34})$$

This choice is well guided by the physical pictures, but nothing motivates this particular choice in terms of statistical convergence. We have indeed already mentioned that the ideally optimized choice (if it was practicable) would be that of [Eq. D.31](#) and [Eq. D.32](#), but for [Eq. D.33](#) and [Eq. D.34](#) to match [Eq. D.31](#) and [Eq. D.32](#), it is required that $f(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) \approx f(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}) \approx s(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}) \approx s(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega})$. This is a fair approximation only in the limit of thermodynamic equilibrium and this strongly limits the applicative potential.

Conclusions

Altogether, the null-collision concept was revisited, thinking more specifically of radiative transfer applications. The corresponding algorithms introduce no specific convergence difficulty, which is not surprising considering the well known similarities between photon-transport and neutron or electron-transport, the two particle-transport physics that motivated initially the introduction of null-collisions in Monte Carlo path-tracking algorithms.

It was also shown, by two different formal means, how null-collision algorithms provide exact unbiased statistical estimations of the solution of the radiative transfer equation. In both cases (in [Sec. D.3](#) and [Sec. D.5](#)), thanks to its linearity properties, the radiative transfer equation was replaced by a rigorous integral-equivalent. In the first case, the radiative transfer equation included null-collisions from the start ; in the second case, null-collisions were introduced at the integral level.

Beside their meaning in terms of algorithmic validation, these integral formulation efforts open two new fields of investigation. We first showed how null-collision algorithms can be slightly transformed in order to deal with the unexpected occurrence of negative values of the null-collision extinction coefficient. We checked that this transformation does not introduce pathological convergence difficulties that would

make it impractical, and our conclusion is that difficulties will only be encountered when the domain of negative null-collision coefficients is optically thick with a high single-scattering albedo. Absorption reduces the difficulty because it reduces the number of times the Monte Carlo weight is multiplied by a negative correction term of absolute value greater than unity. Pathological behaviours will therefore only be encountered when \hat{k} is a poor overestimate of the true extinction coefficient, for scattering dominated media.

If such difficulties were practically encountered, the question could first be addressed by adjusting the branching probabilities P_A , P_S and P_N (we made a practical proposition for these probabilities, but we did not explore alternative choices). Further investigations in this direction would then certainly consist in transforming the integral structure. We suggest furthermore that this question should be enlarged by considering the meaning of the integral structure highlighted in [Sec. D.5](#). It seems indeed that the meshless feature of null-collision algorithms has very little to do with the null-collisions themselves, but rather with an underlying Fredholm formulation that bypasses the question of dealing with path-integrated extinction-coefficients appearing within the exponential function. Introducing null-collisions could then be viewed mainly as a practical way to enhance statistical convergence, very much like introducing control variates in standard Monte Carlo convergence-enhancement techniques. Accordingly, we propose that alternative solutions could be explored starting back from the primary Fredholm formulation. We only opened this investigation field in the last section, but we are convinced that it is worth a close attention.

D.6 Appendixes

D.6.1 APPENDIX 1 - Terminology and bibliographic entries

Null-collision algorithms have been developed independently in two branches of physics : plasma physics and neutron transport. Consequently, according to disciplines and authors, they are found under different designations : null-collisions, fictitious-collisions, pseudo-collisions, null-events, Woodcock-tracking, delta-scattering, pseudo-scattering, etc.

In the field of plasma physics, null-collision algorithms were first formulated by Skullerud in 1968 [[Skullerud, 1968](#)] to sample ion/molecule collision times. This publication led to further refinements in the same application field, for instance [[Lin et Bardsley, 1978](#)], [[Boeuf et Marode, 1982](#)] or [[Brennan, 1991](#)]. These advances have also directly inspired the community studying the dynamics of rarefied gases [[Koura, 1986](#)].

Meanwhile, this technique was developed for neutron transport applications by Woodcock and co-workers [[Woodcock et al., 1965](#)]. They are legitimately recognized as the founders of null-collision algorithms in their field. A significant step was then the formalisation effort reported in [[Coleman, 1968](#)], that enlarged the application potential of Woodcock algorithm. Today, the so-called "Woodcock tracking" is implemented in many transport simulation codes such as SERPENT [[Leppänen, 2010](#)] or MORET [[Forestier et al., 2008](#)]. These ideas have also significantly impacted the

communities of image synthesis and tomography research [Rehfeld et Stute, 2008] [Badal et Badano, 2009] [Tóth et Magdics, 2010].

D.6.2 APPENDIX 2 - Exponential transform

In the literature about exponential transforms [Sarkar et Prasad, 1979, Turner et Larsen, 1997a, Turner et Larsen, 1997b], a new distribution function $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \exp\left(\int_0^L \hat{k}_\sigma d\sigma\right)$ is introduced and is reported in transport equations such as Eq. D.1 to get (here in the particular case of stationary radiation in a non-scattering medium)

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \left[\hat{k}(\mathbf{x}) - k_a(\mathbf{x})\right] g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) + k_a(\mathbf{x}) s(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \exp\left(\int_0^L \hat{k}_\sigma d\sigma\right) \quad (\text{D.35})$$

The problem is then solved in g instead of f , using Monte Carlo approaches, and the arbitrary \hat{k} field is adjusted in order to minimize the variance of the estimator (essentially using adjoint formulation similar to that of the zero-variance literature). Here, we build a Fredholm equation starting from Eq. D.35 (as in *Step 1*) :

$$g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = g(\mathbf{x} - L\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) + \int_0^L d\lambda \left[\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}\right] g(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) + k_{a,\lambda} s_\lambda \exp\left(\int_0^{L-\lambda} \hat{k}_\sigma d\sigma\right) \quad (\text{D.36})$$

Reporting the expression of $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) \exp\left(\int_0^L \hat{k}_\sigma d\sigma\right)$ in Eq. D.36 leads to Eq. D.28.

D.6.3 APPENDIX 3 - Zero-variance strategy

In the Monte Carlo literature, zero-variance refers to algorithms such that the Monte Carlo weight is strictly and systematically equal to the quantity to be estimated independently of the sampling occurrences. This corresponds to ideal convergence in the sense that perfect convergence is obtained with a single Monte Carlo sampling event. The design of such algorithms is always part of pure-theoretical reasoning and can be quite tedious. Here, starting from Eq. D.29 in the restrictive case of $\hat{k} > k_a$ (so that, all terms are positive), such an algorithm can be easily designed using only an ideally optimized importance sampling procedure. Indeed, a random variable Λ of probability density function p_Λ on $[0, +\infty]$ can be introduced to give

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda w(\lambda) \quad (\text{D.37})$$

with

$$w(\lambda) = \frac{1}{p_\Lambda(\lambda)} \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}_\sigma d\sigma\right) \left[k_{a,\lambda} s_\lambda + \left(\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}\right) f(\mathbf{x} - \lambda\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega})\right] \quad (\text{D.38})$$

and $w(\lambda)$ is equal to f whatever the sampled value of λ as soon as

$$p_\Lambda(\lambda) = \frac{1}{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})} \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}_\sigma d\sigma\right) \left[k_{a,\lambda} s_\lambda + \left(\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}\right) f(\mathbf{x} - \lambda \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) \right] \quad (\text{D.39})$$

This is [Eq. D.31](#) exactly, except for recursive notations.

If we now want that the algorithm branches between pure absorption and null-collisions (to recover the algorithmic structure of [Eq. D.9](#) and [Eq. D.10](#)), it suffices to introduce an absorption probability P and write

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \int_0^{+\infty} p_\Lambda(\lambda) d\lambda \{ P w_a(\lambda) + (1 - P) w_n(\lambda) \} \quad (\text{D.40})$$

with

$$w_a(\lambda) = \frac{1}{p_\Lambda(\lambda)} \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}_\sigma d\sigma\right) \frac{k_{a,\lambda} s_\lambda}{P} \quad (\text{D.41})$$

and

$$w_n(\lambda) = \frac{1}{p_\Lambda(\lambda)} \exp\left(-\int_0^\lambda \hat{k}_\sigma d\sigma\right) \frac{\left(\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}\right) f(\mathbf{x} - \lambda \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega})}{1 - P} \quad (\text{D.42})$$

We keep the previous choice for p_Λ ([Eq. D.39](#)), and we still want to achieve $w_a(\lambda) = w_n(\lambda) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$, then we get

$$P = \frac{k_{a,\lambda} s_\lambda}{k_{a,\lambda} s_\lambda + \left(\hat{k}_\lambda - k_{a,\lambda}\right) f(\mathbf{x} - \lambda \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega})} \quad (\text{D.43})$$

Acknowledgements

The research presented in this paper was partially conducted with the support of the ITAAC project (Impact du Trafic Aérien sur l'Atmosphère et le Climat), funded by the *Fondation Sciences et Technologies pour l'Aéronautique et l'Espace* (STAE), Toulouse, France, within the *Réseau Thématique de Recherche Avancée* (RTRA). We also acknowledge support from the European Research Council (Starting Grant 209622 : E3ARTHS) and the FRAE (Fédération de Recherche Aéronautique et Espace) for the STRASS project.

ARTICLE : Null-collision meshless Monte-Carlo - Application to the validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators [Eymet *et al.*, 2013]

Article publié dans *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2013, Issue 129, pp 145-157.
DOI : 10.1016/j.jqsrt.2013.06.004.¹

Auteurs : EYMET V.^a, POITOU D.^b, GALTIER M.^a, EL HAFI M.^a, TERRÉE G.^a, FOURNIER R.^c

a. Université de Toulouse ; Mines Albi, CNRS, centre RAPSODEE ; Campus Jarlard, F-81013 Albi cedex 09, France

b. CERFACS - 42, avenue Gaspard Coriolis - 31057 Toulouse

c. LAPLACE, UMR 5213 - Université Paul Sabatier, 118, Route de Narbonne - 31062 Toulouse Cedex, France

E.1 Abstract

The Monte-Carlo method is often presented as a reference method for radiative transfer simulation when dealing with participating, inhomogeneous media. The reason is that numerical uncertainties are only of a statistical nature and are accurately evaluated by measuring the standard deviation of the Monte Carlo weight. But classical Monte-Carlo algorithms first sample optical thicknesses and then determine absorption or scattering locations by inverting the formal integral definition of optical thickness as an increasing function of path length. This function is only

1. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407313002483>

seldom analytically invertible and numerical inversion procedures are required. Most commonly, a volumic grid is introduced and optical properties within each cell are replaced by approximate homogeneous or linear fields. Simulation results are then sensitive to the grid and can no longer be considered as references. We propose a new algorithmic formulation based on the use of null-collisions that eliminate the need for numerical inversion : no volumic grid is required. Benchmark configurations are first considered in order to evaluate the effect of two free parameters : the amount of null-collisions, and the criterion used to decide at which stage a Russian Roulette is used to exit the path tracking process. Then the corresponding algorithm is implemented using a development environment allowing to deal with complex geometries (thanks to computer graphics techniques), leading to a Monte Carlo code that can be easily used for validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators. “Easily” means here that the way the Monte Carlo algorithm deals with both the geometry and the temperature/pressure/concentration fields is independent of the choices made inside the combustion solver : there is no need for the design of a new path-tracking procedure adapted to each new CFD grid. The Monte Carlo simulator is ready for use as soon as combustion specialists provide a localization/interpolation tool defining what they consider as the continuous input fields best suiting their numerical assumptions. The radiation validation tool introduces no grid in itself

Keywords : Monte Carlo ; Null-Collision ; Heterogeneous Media ; Integral formulation ; Combustion

E.2 Introduction

Industrial applications, such as combustion processes, require radiative transfer modeling, often coupled with other energy transfer mechanisms. Numerical radiative transfer solvers used in such applications need to reach the best compromise between numerical accuracy and computation cost. These tools also need validation, and therefore reference numerical methods have to be used. The Monte-Carlo method (MCM) is known to be one of these reference methods. Like all other methods, MCM evaluates numerically the solution of the radiative transfer equation (RTE) and its “reference” status is only due to the existence of a rigorous measure of its uncertainty : from its statistical nature, MCM allows the systematic calculation of a standard deviation associated to each numerical result, and this standard deviation is translated into a numerical uncertainty thanks to the central limit theorem. However, designing Monte-Carlo algorithms to be used in complex geometries has long been a quite challenging task, mainly because of prohibitive computational costs. Using MCM to produce references and validate the radiative parts of heat-transfer or combustion solvers was therefore hardly feasible outside academic configurations. Recent developments, such as the work reported by Zhang et al. [[Zhang et al., 2009](#), [Zhang, 2011](#)], show that this is now practically feasible whatever the complexity of industrial geometries. We here propose to further develop such tools using a

meshless Monte-Carlo algorithm based on the null-collision technique introduced in [Galtier *et al.*, 2013].

Monte-Carlo algorithms dealing with participating media [Farmer et Howell, 1998, Modest, 2013, De Guilhem De Lataillade *et al.*, 2002b, Eymet *et al.*, 2005, Eymet *et al.*, 2004, Eymet *et al.*, 2009, De La Torre *et al.*, 2014] are commonly formulated so that they sample the optical thickness. One major feature of such algorithms is that a correspondence must be established between any value of the optical thickness, along any optical path, and the physical position associated to this optical thickness within the heterogeneous participating medium. As optical thickness is an increasing function of path-length, this inversion is always possible, without approximation, using standard numerical inversion techniques, but these techniques rapidly require prohibitive computation powers. A possibility to speed-up the inversion procedure is the use of a volumic grid [Siegel *et al.*, 2011] together with simple enough approximate profiles for optical properties within each cell, allowing an analytic inversion of position from optical thickness. However, introducing such a volumic grid involves an unwanted consequence : simulation results depend on the retained particular grid (as with any deterministic approach), and MCM loses its “reference” status.

Concerning volume discretization, let us clarify some vocabulary to be used throughout the text. The question that we address is the production of reference solutions of the RTE for temperature, pressure and concentration fields provided by combustion specialists wishing to validate their radiation solvers. These *input fields* may have any form. They may be analytic when academic benchmarks are considered, they may be based on local measurements at structured or unstructured grid points in experimental contexts, or based on the structured or unstructured outputs of fluid-mechanics/chemistry codes in pure numerical contexts. In all cases the input fields will be *complete*, meaning that temperature, pressure and concentrations are defined at all locations. In experimental and numerical contexts, this requires that combustion specialists provide not only the grid point data, but also a meaningful *interpolation model* to complete the fields throughout the volume (meaningful with regard to fluid mechanics and chemistry). *Reference RTE solutions* will be produced without discussing this interpolation model, and the corresponding algorithm will be called a *meshless algorithm* if it is fully independent of the input-field type, and if it introduces no discretization procedure in itself.

Recent methodological developments [Galtier *et al.*, 2013, Rehfeld et Stute, 2008, Badal et Badano, 2009] indicate that it is possible to use so-called null-collision Monte-Carlo algorithms in the field of radiative transfer simulation. One major characteristic of null-collision algorithms (NCA) is that they do not require any volumic grid. They are no longer formulated using optical thicknesses. Path-length (and thus position) is directly sampled according to a probability density function of the form $p_{\Lambda}(\lambda) = \exp\left(-\int_0^{\lambda} \hat{k}(\sigma)d\sigma\right)$, that is to say according to a Beer-Lambert extinction law in which the true extinction coefficient k is replaced by an overestimate \hat{k} , chosen in such a way that sampling p_{Λ} is mathematically straightforward. In neutron and plasma physics, where the method was first introduced, the \hat{k} field was most commonly chosen uniform (or uniform by parts) and λ was sampled as $\lambda = \frac{1}{\hat{k}} \log(r)$, with r a uniformly sampled value in the unit interval. Of course,

sampling λ using an overestimate of the true extinction field introduces a bias, but this bias is compensated by the use of a rejection test : when rejection occurs the path is continued straightforward as if no collision occurred.

These algorithms can be interpreted (and rigorously justified) using simple physical pictures. Let us note $k_n = \hat{k} - k$. This additional extinction coefficient, k_n , can be interpreted as due to null-collisions, i.e. collisions that lead to a pure forward scattering event. Obviously such additional collisions change nothing to the radiative transfer problem. However, k_n can be chosen in such a way that the new total extinction coefficient $\hat{k} = k + k_n$ has a simple shape (for instance uniform) and allows easy path-length sampling procedures. But then, when a collision occurs, it can either be a true collision, with probability $P = \frac{k}{\hat{k}}$, or a null collision, with probability $1 - P$, and this is how the rejection method is justified : if a null-collision occurs, the path is continued straightforward as if no collision occurred.

The only reported practical difficulty is the choice of the \hat{k} field (or of k_n as they are directly related). Indeed \hat{k} must be greater than k at all locations, but it must also be as close to k as possible in order to avoid that too many rejections occur, which would lead to computationally expensive sequences of path-length sampling and forward continuations until a true collision occurs. This compromise can be hard to reach, even in the most standard combustion configurations because of the flame heterogeneities as well as the non-linear dependence of gaseous absorption with temperature, pressure and concentrations. But most of this difficulty vanishes thanks to the theoretical developments of [Galtier *et al.*, 2013] that allow to handle rigorously the occurrence of negative null-collisions : the authors show indeed that the best choice is still that \hat{k} be as close an overestimate of k as possible, but such a close adjustment can now be achieved without strictly excluding that $\hat{k} < k$ in some parts of the field.

We present hereafter an implementation of a slightly modified version of the null-collision algorithm (that of [Galtier *et al.*, 2013]). It is designed for radiative transfer simulation in combustion processes. The corresponding code has been developed using the Mcm3D library, within the EDStaR development environment [Starwest, 2014a, De La Torre *et al.*, 2014]. Its purpose is to compute the radiative budget density at a number of selected locations within any given geometric configuration, with a systematic control of the numerical uncertainty (of course not of the uncertainty due to the physical model itself, in particular to absorption properties). **Sec. E.3** gives all the details of the proposed null-collision algorithm for a both absorbing and scattering semi-transparent medium, enclosed by opaque reflective surfaces. **Sec. E.4** and **Sec. E.5** present simulation examples. In **Sec. E.4**, an academic configuration is considered. The new null-collision algorithm is first validated against the benchmark simulation results of [Galtier *et al.*, 2013]. Then we analyze its behavior, both in terms of convergence and computation time, when modifying two free parameters : the amount of null-collisions, and the criterion used to decide at which stage a Russian Roulette is used to exit the path tracking process. In **Sec. E.5**, the same algorithm is used for simulation of radiation within the true geometry of a well referenced laboratory combustion-chamber, as an example of the type of validation procedures that are required when using the PRISMA code as part of the combustion simulation code AVBP [Poitou *et al.*, 2012].

Let us point out a very essential choice made throughout the present text. Null collision algorithms allow to avoid the design of path-tracking procedures computing intersections between rays and large meshes. They may therefore be considered in two distinct practical contexts :

- when there is a need for speeding up Monte Carlo solvers (only the intersections with the boundary are computed) ;
- when there is a need for flexibility (designing Monte Carlo solvers independently of the mesh structures, using them in distinct contexts without additional specific development).

We are here attempting to answer the second need only. Our purpose is to provide a reference-simulation methodology that combustion specialists may use whatever the numerical choices made inside their CFD and chemistry solvers. The first need is undeniably worth some close attention, but this requires that comparisons are performed against the best up-to-date path-tracking algorithms (that the present authors do not know with enough details) in order to evaluate clearly the respective benefits and losses of computing many intersections, versus dealing with repeated null-collision events.

E.3 Algorithm

The purpose of the proposed algorithm is to compute $S_r(\mathbf{x}_0) = \int_{IR} S_{r,\nu}(\mathbf{x}_0) d\nu$, the radiative budget density at any location \mathbf{x}_0 within the emitting, absorbing and scattering volume, considering the whole thermal infrared spectral range. The involved optico-geometric and spectral integration will be considered successively. The optico-geometric integration is presented in [Sec. E.3.1](#). For didactic reasons this first presentation excludes the occurrence of negative values of the null-collision coefficient (\hat{k} is always greater than k) and [Sec. E.3.2](#) generalizes the proposition to any \hat{k} . These two subsections are sufficient for the monochromatic parametric study of [Sec. E.4](#). Spectral integration is presented in [Sec. E.3.3](#) and the complete resulting null-collision algorithm is used in the combustion example of [Sec. E.5](#).

E.3.1 Optico-geometric integration

In [[Galtier et al., 2013](#)], a reverse path-tracking algorithm is proposed for the evaluation of $S_{r,\nu}(\mathbf{x}_0)$ in which a very standard null-collision approach is used : branching probabilities are used to select either an absorption, a scattering event, or a null-collision. In this algorithm, when absorption occurs, the optical path is interrupted and the Monte Carlo weight is computed using the emission properties at the collision location. Very similarly, branching probabilities are used when a boundary is encountered, and either reflection occurs and the optical path is continued, or absorption occurs and the optical path is interrupted, the Monte Carlo weight being computed using the local surface emission properties (see the third section of [[Galtier et al., 2013](#)]). As far as surface interaction is concerned, it is well established that various Monte Carlo strategies can be preferred to the simple absorption/reflection branching test, a test that is commonly named a *Russian Roulette*.

Instead of using this Russian Roulette, the fraction of absorbed photons can be computed (according to the surface absorptivity), their contribution to the addressed quantity can be evaluated and stored (as a first contribution to the Monte Carlo weight), and the remaining fraction can be reflected, continuing the path-following procedure until an extinction criterion is reached (such a strategy can be found in the literature under the names of *energy-partitioning* [Shamsundar *et al.*, 1973]² or *pathlength method* [Farmer et Howell, 1998]. When successive reflections have led to an extinction stronger than this criterion, either the algorithm is stopped (but then numerical errors are introduced that need to be considered in addition to the statistical uncertainty), or the Russian Roulette is recovered in order to ensure that the algorithm ends without any statistical bias. The algorithm presented hereafter is a strict application of such a strategy to the algorithm of [Galtier *et al.*, 2013], however it is applied not only to the absorption/reflection branching tests, but also to the absorption/scattering/null-collision branching tests. Of course, considering our objective to produce reference simulation results for validation of other radiation solvers, after the extinction criterion is reached, we retain the choice of recovering the Russian Roulette, rather than truncating the path-integrals, in order to ensure that no statistical bias is introduced and that the displayed standard deviations can be faithfully interpreted as numerical uncertainties. Hereafter, the extinction criterion is denoted by ζ and the remaining fraction after j collisions is denoted by ξ_j (at the beginning, when no collision has yet occurred, $\xi_0 = 1$, when the $j + 1^{th}$ collision takes place in the medium $\xi_{j+1} = \xi_j(1 - \frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{k(\mathbf{x}_{j+1})})$ and when it occurs on the boundary $\xi_{j+1} = \xi_j(1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{j+1}))$ and so on until $\xi_j < \zeta$).

The resulting algorithm is fully described in the Fig. E.1. The starting point is the sampling of a direction ω_0 at probe location \mathbf{x}_0 (*step A2* of Fig. E.1), the computation will loop on the "energy partitioning" branch (*B1-B16*) until the criterion ζ is reached. More precisely, in each loop, a free path length is sampled (*B1*) according to the modified Beer probability density function $p_\Lambda(\lambda) = \hat{k}(\mathbf{x} - \lambda\omega) \exp\left(\int_0^\lambda \hat{k}(\mathbf{x} - \sigma\omega) d\sigma\right)$. The collision location is then computed : either it occurs in the medium (*B3*) or on the boundary (*B12*). If it occurs in the medium, the absorption contribution is added to the Monte-Carlo weight (*B4*), then a standard Bernoulli trial is used to determine if the path-following will continue according to a scattering event or a null-collision (*B5-B7*) : a number r_{j+1} is uniformly sampled in $[0, 1]$ and is compared to the scattering probability. In both cases, the new value of the factor ξ_{j+1} and the corresponding new direction ω_{j+1} are computed (*B8-B11*). If the collision occurs on the boundary, the absorption contribution is taken into account for the Monte-Carlo weight calculation (*B13*), the value of ξ_{j+1} is actualized (*B14*) and a reflection direction is sampled (*B15*). Once this new direction (caused by scattering, null-collision or reflection) is known the algorithm loops to *step A3*. These loops will continue until the extinction criterion ζ is reached ($\xi_{j+1} < \zeta$), in which case the algorithm switches to the "Russian Roulette" one (*C1-C18*) introduced in

2. Originally, this concept was introduced to compute the apparent emittance of isothermal-walled cavities by taking into account, in a deterministic way, the geometric fraction passing through an aperture at each reflection. Nowadays, the term "energy-partitioning" commonly refers to surface reflection and attenuation by participating media the way we reported it [Wang et Modest, 2007a].

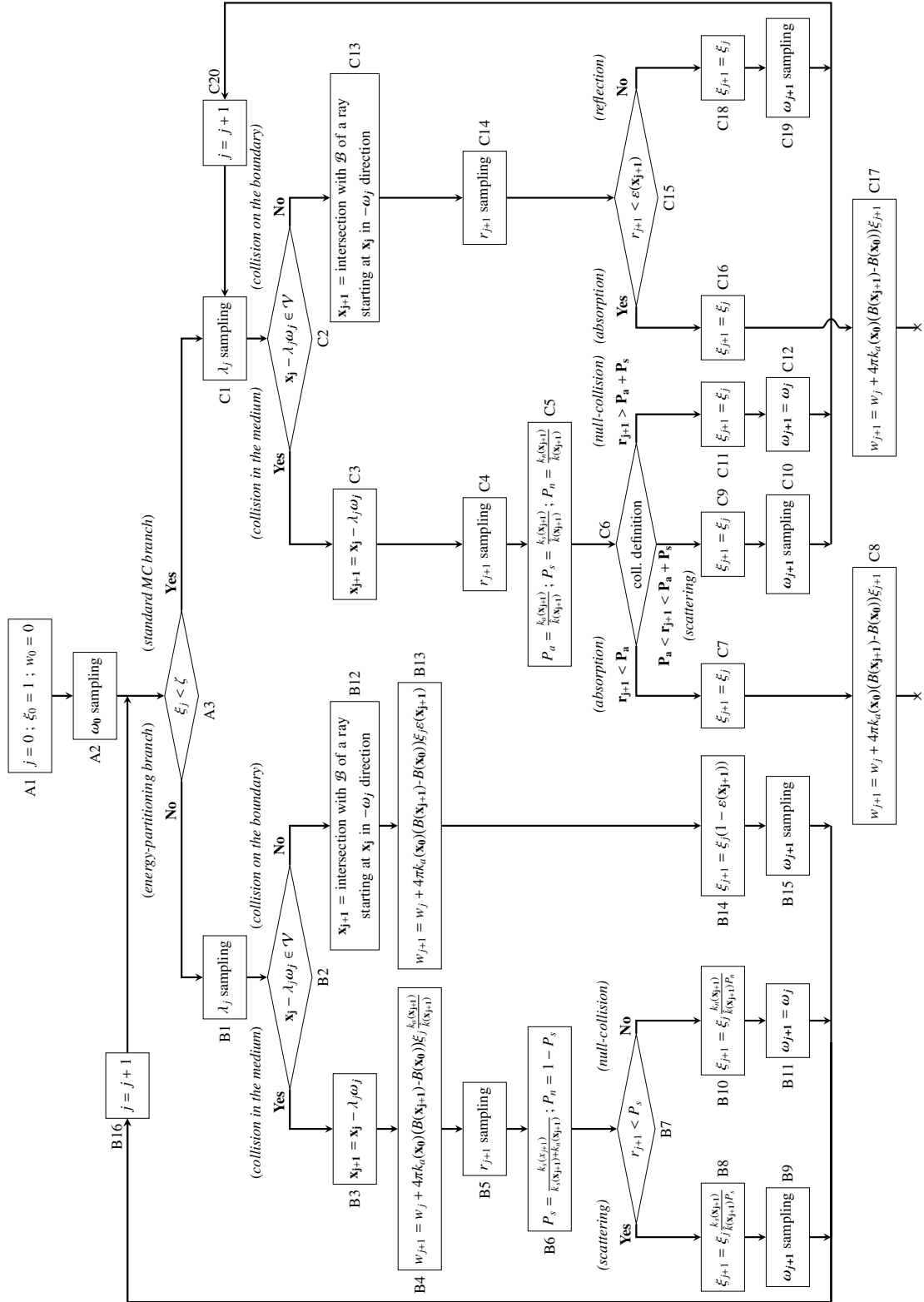


FIGURE E.1 – Description of the proposed algorithm. It follows a energy-partitioning strategy until the extinction term ξ is less than a fixed criterion ζ in which case it switches to the algorithm introduced in [Galtier *et al.*, 2013].

[Galtier *et al.*, 2013] where the Monte-Carlo weight expression is slightly modified to consider the extinction associated to the previous "energy-partitioning" branch.

As all Monte-Carlo algorithms, this one has been designed through a formal integral work. The major steps of such a work are described below for an infinite medium. Walls are ignored here to lighten the mathematical formalism, but their introduction would not lead to major difficulties, it would just add a new branching test to determine if the collision occurs on boundary or in the media.

The addressed quantity is

$$S_{r,\nu}(\mathbf{x}_0) = \int_{4\pi} k_a(\mathbf{x}_0) [I(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\omega}_0) - B(\mathbf{x}_0)] d\boldsymbol{\omega}_0 \quad (\text{E.1})$$

where $I(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\omega}_0)$ is the incoming specific intensity (at location \mathbf{x}_0 is the direction $\boldsymbol{\omega}_0$), and $B(\mathbf{x}_0)$ is the equilibrium or black-body specific intensity at the temperature of the medium at \mathbf{x}_0 . The only difficulty lies in $I(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\omega}_0)$ that we obtain using the following recursive integral expression :

$$\begin{aligned} I(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) = & \int_0^{+\infty} d\lambda_j \exp \left(- \int_0^{\lambda_j} k_a(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}_j) + k_s(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}_j) d\sigma_j \right) \\ & \times \left[k_a(\mathbf{x}_{j+1}) B(\mathbf{x}_{j+1}) + k_s(\mathbf{x}_{j+1}) \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

with $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \lambda_j \boldsymbol{\omega}_j$ and p_S the single scattering phase function. Eq. E.2 is the formal solution of the stationary radiative transfer equation

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = - [k_a(\mathbf{x}) + k_s(\mathbf{x})] I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) + k_a(\mathbf{x}) B(\mathbf{x}) + \int_{4\pi} k_s(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_S(\boldsymbol{\omega} | \boldsymbol{\omega}', \mathbf{x}) d\boldsymbol{\omega}' \quad (\text{E.3})$$

The introduction of null-collisions in this differential equation consists in adding $-k_n(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) + \int_{4\pi} k_n(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') \delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}', \mathbf{x}) d\boldsymbol{\omega}'$ to the right hand side. The Dirac distribution δ implies $\int_{4\pi} k_n(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') \delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}', \mathbf{x}) d\boldsymbol{\omega}' = k_n(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ which ensures that the added quantity is null and therefore that the following modified radiative transfer equation has the exact same solution as Eq. E.3 :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = & - [k_a(\mathbf{x}) + k_s(\mathbf{x}) + k_n(\mathbf{x})] I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) + k_a(\mathbf{x}) B(\mathbf{x}) \\ & + \int_{4\pi} k_s(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') p_S(\boldsymbol{\omega} | \boldsymbol{\omega}', \mathbf{x}) d\boldsymbol{\omega}' + \int_{4\pi} k_n(\mathbf{x}) I(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}') \delta(\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}', \mathbf{x}) d\boldsymbol{\omega}' \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

The formal solution of this new radiative transfer equation is now

$$\begin{aligned}
 I(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) = & \int_0^{+\infty} d\lambda_j \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}_j) d\sigma_j\right) \left[k_a(\mathbf{x}_{j+1}) B(\mathbf{x}_{j+1}) \right. \\
 & + k_s(\mathbf{x}_{j+1}) \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \\
 & \left. + k_n(\mathbf{x}_{j+1}) \int_{4\pi} \delta(\boldsymbol{\omega}_j - \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \right]
 \end{aligned} \tag{E.5}$$

which can be rewritten

$$\begin{aligned}
 I(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) = & \int_0^{+\infty} \hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}_j) d\sigma_j\right) d\lambda_j \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})} B(\mathbf{x}_{j+1}) \right. \\
 & + \frac{k_s(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \\
 & \left. + \frac{k_n(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \delta(\boldsymbol{\omega}_j - \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \right]
 \end{aligned} \tag{E.6}$$

This is almost a formal translation of the algorithm described in [Fig. E.1](#) for an infinite medium (except that in the algorithm of [Fig. E.1](#), $S_{r,\nu}(\mathbf{x}_0)$ is directly computed whereas we here focus on $I(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\omega}_0)$). Indeed, it suffices to introduce a scattering branching probability P_s to recover the "Energy-Partitioning" branch :

$$\begin{aligned}
 I(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) = & \int_0^{+\infty} \hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}_j) d\sigma_j\right) d\lambda_j \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1})} B(\mathbf{x}_{j+1}) \right. \\
 & + P_s(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_s(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) P_s(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \\
 & \left. + (1 - P_s(\mathbf{x}_{j+1})) \frac{k_n(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) (1 - P_s(\mathbf{x}_{j+1}))} I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1} = \boldsymbol{\omega}_j) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \right]
 \end{aligned} \tag{E.7}$$

Algorithmically, P_s is interpreted as a test, since it can be expressed as $P_s = \int_0^1 H(P_s - r) dr$ where H is the Heaviside function. Concretely, r is numerically sampled, to determine the branch to follow (the scattering one if $r < P_s$ or the null-collision one otherwise). However, since this "Energy-Partitioning" branch loops endlessly, we also need to recover the recursive integral formulation of [\[Galtier et al., 2013\]](#) ("Russian Roulette" branch of [Fig. E.1](#)) by introducing complementary absorption/scattering/null-collision branching probabilities (respectively P_a ,

P_s and P_n :

$$I(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) = \int_0^{+\infty} \hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) \exp\left(-\int_0^{\lambda_j} \hat{k}(\mathbf{x}_j - \sigma_j \boldsymbol{\omega}_j) d\sigma_j\right) d\lambda_j$$

$$\times \left\{ \begin{aligned} &P_a(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) P_a(\mathbf{x}_{j+1})} B(\mathbf{x}_{j+1}) \\ &+ P_s(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_s(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) P_s(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} p_S(\boldsymbol{\omega}_j | \boldsymbol{\omega}_{j+1}, \mathbf{x}_{j+1}) I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1}) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \\ &+ P_n(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_n(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}(\mathbf{x}_{j+1}) (P_n(\mathbf{x}_{j+1}))} I(\mathbf{x}_{j+1}, \boldsymbol{\omega}_{j+1} = \boldsymbol{\omega}_j) d\boldsymbol{\omega}_{j+1} \end{aligned} \right\} \quad (\text{E.8})$$

where P_a , P_s and P_n are now algorithmically interpreted as tests (as for P_s in Eq. E.7). The whole Monte-Carlo weight of a realization of this algorithm (still without boundaries) is then given by

$$w_i = \sum_{j=0}^{j_{1,max}} \left[\frac{k_a(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j)} B(\mathbf{x}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \prod_{m=0}^{j-1} \left[\mathcal{H}(\gamma_{s,m}) \frac{k_s(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j) P_s(\mathbf{x}_j)} + \mathcal{H}(\gamma_{n,m}) \frac{k_n(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j) (1 - P_s(\mathbf{x}_j))} \right] \right]$$

$$+ B(\mathbf{x}_{j_{max}}, \boldsymbol{\omega}_{j_{max}}) \prod_{m=0}^{j_{1,max}} \left[\mathcal{H}(\gamma_{s,m}) \frac{k_s(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j) P_s(\mathbf{x}_j)} + \mathcal{H}(\gamma_{n,m}) \frac{k_n(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}(\mathbf{x}_j) (1 - P_s(\mathbf{x}_j))} \right] \quad (\text{E.9})$$

where the subscript $j_{1,max}$ is the index of the last collision of the "Energy-partitioning" branch and j_{max} the index of the last absorption, which ends the algorithm. $\mathcal{H}(\gamma_{s,m})$ equals 1 if the m^{th} collision is a scattering event, 0 otherwise. In the same way, $\mathcal{H}(\gamma_{n,m})$ equals 1 if the m^{th} collision is a null-collision, 0 otherwise.

The estimation \tilde{I} of $I(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\omega}_0)$ using N independent realizations is then :

$$\tilde{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i \quad (\text{E.10})$$

and the corresponding standard deviation is then evaluated :

$$\sigma = \frac{1}{N-1} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [w_i^2 - \tilde{I}^2]} \quad (\text{E.11})$$

E.3.2 Extension to negative null-collision coefficients

Up to now, for didactic reasons, we described an algorithm only dealing with positive values of the null-collision coefficient. However, it is possible to extend its scope to negative ones through slight modifications. According to the proposal made in [Galtier *et al.*, 2013], negative null-collisions coefficients can be admitted by introducing new arbitrary probabilities of absorption/scattering/null-collision occurrences. Concretely, it results in modifying some steps of the preceding algorithm :

- In *step B6* of [Fig. E.1](#), we choose to define the new probability P_s as $P_s = \frac{k_s(\mathbf{x}_{j+1})}{k_s(\mathbf{x}_{j+1}) + |k_n(\mathbf{x}_{j+1})|}$
- Similarly, in *step C6*, the new probabilities are chosen as : $P_a = \frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{k_a(\mathbf{x}_{j+1}) + k_s(\mathbf{x}_{j+1}) + |k_n(\mathbf{x}_{j+1})|}$, $P_s = \frac{k_s(\mathbf{x}_{j+1})}{k_a(\mathbf{x}_{j+1}) + k_s(\mathbf{x}_{j+1}) + |k_n(\mathbf{x}_{j+1})|}$ and $P_n = \frac{|k_n(\mathbf{x}_{j+1})|}{k_a(\mathbf{x}_{j+1}) + k_s(\mathbf{x}_{j+1}) + |k_n(\mathbf{x}_{j+1})|}$.
- This leads to a modification of the ξ_{j+1} expressions. They become $\xi_{j+1} = \xi_j \frac{k_a(\mathbf{x}_{j+1})}{k(\mathbf{x}_{j+1})P_a}$ for the absorption branch (*C7*), $\xi_{j+1} = \xi_j \frac{k_s(\mathbf{x}_{j+1})}{k(\mathbf{x}_{j+1})P_s}$ for the scattering one (*C9*) and $\xi_{j+1} = \xi_j \frac{k_n(\mathbf{x}_{j+1})}{k(\mathbf{x}_{j+1})P_n}$ for the null-collision branch (*C11*).

These new arbitrary probabilities allow to get rid of the constraint that the \hat{k} field is a strict upper bound of k . They lead strictly to the algorithm of [Sec. E.3.1](#) when $\hat{k} > k_a + k_s$ and to a legible extension when $\hat{k} < k_a + k_s$.

E.3.3 Spectral integration

Starting from the above described algorithm, spectral integration of the monochromatic radiative budget can be simply performed by adding a procedure in which frequency is sampled according to any probability density function $p_\nu(\nu)$ on the considered spectral interval \mathcal{I} . This is justified by writing

$$S_r(\mathbf{x}_0) = \int_{\mathcal{I}} S_{r,\nu}(\mathbf{x}_0) d\nu = \int_{\mathcal{I}} p_\nu(\nu) d\nu \frac{S_{r,\nu}(\mathbf{x}_0)}{p_\nu(\nu)} \quad (\text{E.12})$$

which tells us that all what is required is sampling ν according to p_ν , and dividing by $p_\nu(\nu)$ the Monte Carlo weight of [Eq. E.9](#). But practically, the procedure is slightly more difficult because only very few attempts have been made to perform Monte Carlo integrations starting from the high-resolution absorption line-spectra of combustion gases over the whole infrared [[Wang et Modest, 2007b](#), [Fomin, 2006](#)]. In most cases, "reference" Monte Carlo simulations are still performed using k-distribution approaches, together with the correlated-k assumption (or the fictitious-gas correlated-k assumption) for representation of spectral heterogeneities. This is the approach that we retain here, which imposes that instead of sampling frequency, the algorithm starts by sampling a narrow-band index i according to a narrow-band probability set $(P_{I,1}, P_{I,2} \dots P_{I,N})$ where N is the number of narrow frequency-bands \mathcal{I}_i , of width $\Delta\nu_i$, required to cover the whole spectral range : $\mathcal{I} = \mathcal{I}_1 \cup \mathcal{I}_2 \dots \mathcal{I}_N$. Then a discrete-k index j is sampled according to a probability set $(P_{K,i,1}, P_{K,i,2} \dots P_{K,i,M})$, where M is the number of discrete-k values, within each narrow band, chosen in accordance with a Gaussian-quadrature of weights $(\mu_1, \mu_2 \dots \mu_M)$. The optico-geometric algorithm of [Sec. E.3.1](#) is unchanged, replacing only the local value of the monochromatic absorption-coefficient k_a by the local value of the j -th discrete-k, $k_{a,i,j}$, within the i -th narrow-band, and using the local scattering properties corresponding to the i -th narrow band³. This is the direct algorithmic translation of [Eq. E.12](#) being

3. Scattering properties are assumed independent of frequency within each band : this is part of the narrow-band assumption, allowing the re-ordering of absorption-coefficients and the formal definition of k-distributions in their original sense. Note that multiple-dimension re-ordering, such as that of [[André et Vaillon, 2012](#)], could allow to relieve this constraint.

approximated as :

$$S_r(\mathbf{x}_0) \simeq \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M S_r(i, j) \mu_j \Delta \nu_i \quad (\text{E.13})$$

where $S_r(i, j)$ is the monochromatic budget obtained by using the Planck function value of the i -th band and the j -th value of the discrete absorption coefficients, i.e. $k_{a,i,j}$. Introducing the two probability sets $(P_{I,1}, P_{I,2} \dots P_{I,N})$ and $(P_{K,i,1}, P_{K,i,2} \dots P_{K,i,M})$ we get :

$$S_r(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^N P_{I,i} \sum_{j=1}^M P_{K,i,j} \left\{ \frac{S_r(i, j) \mu_j}{P_{I,i} P_{K,i,j}} \Delta \nu_i \right\} \quad (\text{E.14})$$

This indicates that the Monte Carlo weight of [Eq. E.9](#) must be replaced by the same weight multiplied by $\mu_i \Delta \nu_i$ and divided by $P_{K,i,j} P_{I,i}$.

The probability sets may be chosen arbitrarily : for instance identical probabilities for $(P_{I,1}, P_{I,2} \dots P_{I,N})$, i.e. $P_{I,i} = 1/N$, and $P_{K,i,j} = \mu_j$. But they can also be chosen on the basis of analytic estimations of the radiative budget at the probe location. The choice will only have consequences in terms of statistical uncertainties and this question is only worth a detailed attention when it is observed that producing accurate solutions requires unpractical computation times. In such cases, it may be useful to consider the work reported in [Dauchet *et al.*, 2013], concerning the practice of the zero-variance concept, their studied solar receiver being close to combustion devices both as far as spectral integration and geometry-complexity requirements are concerned. As far as we are concerned, in [Sec. E.5](#), we will use a very simple model assuming that $S_r(\mathbf{x}_0) = 4\pi k_{a,\nu} B(\mathbf{x}_0)$, which corresponds to the optically thin limit with 0K surfaces. The only role of this model is to helps us choose the probability sets as :

$$P_{I,i} = \frac{\Delta \nu_i \bar{k}_{a,i}}{\sum_{q=1}^N \Delta \nu_q \bar{k}_{a,q}} \quad (\text{E.15})$$

and

$$P_{K,i,j} = \frac{\mu_j \bar{k}_{a,i,j} \mu_i}{\bar{k}_{a,i}} \quad (\text{E.16})$$

where $\bar{k}_{a,i} = \sum_{j=1}^M \mu_j k_{a,i,j}$ is the average value of the absorption coefficient within the i -th narrowband. Modifying this choice would only impact the convergence rate but not the final simulation result.

For a better representation of heterogeneities, it is often very efficient (at least for most combustion applications) to treat separately the various absorbing molecular species. Instead of using a single k-distribution for the mixture, as in the above presentation, a separate k-distribution is introduced for each gas and these distributions are assumed independent [Taine et Soufiani, 1999]. Practically, this implies simply that a P_K probability set is introduced for each gas and is used to sample an index j independently for each gas. The absorption coefficient is then the sum of the $k_{a,i,j}$ of each gas, and the Monte Carlo weight is multiplied by the product of all $P_{K,i,j}$. In the case of two gases, say H_2O and CO_2 as in [Sec. E.5](#), this can be pictured by

Eq. E.14 becoming

$$S_r(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^N P_{I,i} \sum_{j^{H_2O}=1}^M P_{K,i,j^{H_2O}}^{H_2O} \sum_{j^{CO_2}=1}^M P_{K,i,j^{CO_2}}^{CO_2} \left\{ \frac{S_r(i, j^{H_2O}, j^{CO_2}) \mu_{j^{H_2O}} \mu_{j^{CO_2}}}{P_{I,i} P_{K,i,j^{H_2O}}^{H_2O} P_{K,i,j^{CO_2}}^{CO_2}} \Delta \nu_i \right\} \quad (\text{E.17})$$

E.4 Convergence levels and computation times

The algorithm presented in the previous section is now implemented for the evaluation of monochromatic radiative budgets in the benchmark configuration of [Galtier *et al.*, 2013]. This implementation is validated against the results of [Galtier *et al.*, 2013] that were themselves validated against the results of a standard Monte Carlo solver. Our new code is then used to analyze how the convergence levels and the computation times depend on \hat{k} and ζ .

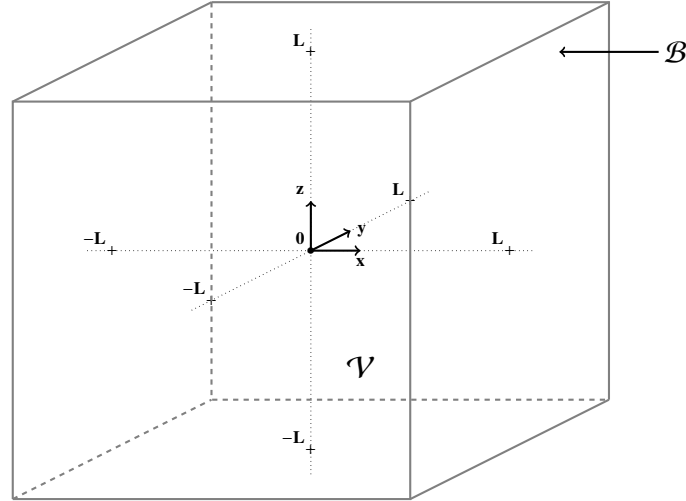


FIGURE E.2 – Considered system : a cube of side $2L$, whose center is the Cartesian coordinate system origin (figure taken from [Galtier *et al.*, 2013]).

In [Galtier *et al.*, 2013], the considered system is a cube, of side $2L$, with $0K$ diffuse-reflecting faces, of uniform emissivity ε , that are perpendicular to the x , y and z axis of a Cartesian coordinate system originating at the center of the cube (see Fig. E.2). The enclosed medium is heterogeneous both in temperature and optical properties. The k_a , k_s and B fields are $k_a(x, y, z) = k_{a,max} \left(\frac{L-x}{2L} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2+z^2}{2L^2}} \right)$, $k_s(x, y, z) = k_{s,max} \left(\frac{L-x}{2L} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2+z^2}{2L^2}} \right)$ and $B(x, y, z) = B_{max} \left(\frac{L-x}{2L} \right) \left(1 - \sqrt{\frac{y^2+z^2}{2L^2}} \right)$, figuring an axisymmetric flame along the x axis (maximum temperature and maximum extinction along the axis, and a linear decay as function of the distance to the axis, down to zero at the corners). The Henyey-Greenstein single-scattering phase function is used with a uniform value of the asymmetry parameter g throughout the field. \hat{k} is uniform and the parametric study deals with $\rho = \frac{\hat{k}}{k_{a,max} + k_{s,max}}$, $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$, g and ε . Here, we reduce the parametric size by sticking to isotropic scattering

($g = 0$) because, as indicated in [Galtier *et al.*, 2013], changing g leads to different radiative-source values but to identical conclusions as far as numerical features are concerned. However, we add a new parameter : ζ , that is to say the extinction level after which a Russian Roulette is used. Independently of the validation objective, our algorithm will be systematically compared to that of [Galtier *et al.*, 2013] in order to highlight the effect of continuing the path-following process and adding the contributions, by opposition with systematically using a Russian Roulette at collisions and reflection events.

Tab. E.1 and Tab. E.2 display simulation results for $x = [0, 0, 0]$ (the center of the cube) and $x = [-L, 0, 0]$ (the location of the maximum values of B , k_a and k_s). The simulation results of [Galtier *et al.*, 2013] are reported under the label $\zeta = 1$. Indeed, for $\zeta = 1$ our new algorithm recovers exactly the algorithm of [Galtier *et al.*, 2013]. The first observation that can be made on these tables is that, considering the standard deviations, our simulation results are compatible with those of [Galtier *et al.*, 2013], which validates our algorithmic implementation. The last

Optical thickness		$\zeta = 0.1$					$\zeta = 1$					ratio
$k_{a,max}L$	$k_{s,max}L$	$\frac{A}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{\sigma}}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{\sigma}}$	σ_{rel}	t	$t_{1\%}$	$\frac{A}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{\sigma}}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}^{\sigma}}$	σ_{rel}	t	$t_{1\%}$	$\frac{t_{1\%}(\zeta=0.1)}{t_{1\%}(\zeta=1)}$
0.1	0.1	-0.483586	0.000044	9.072e-05	2.31	0.00019	-0.483668	0.000086	1.771e-04	2.40	0.00075	0.253
0.1	1	-0.481950	0.000024	4.965e-05	7.77	0.00019	-0.482038	0.000090	1.857e-04	7.74	0.00267	0.072
0.1	3	-0.477917	0.000023	4.788e-05	23.72	0.00054	-0.477733	0.000099	2.082e-04	22.94	0.00995	0.055
0.1	10	-0.463036	0.000035	7.583e-05	122.94	0.00707	-0.463086	0.000126	2.729e-04	116.60	0.08685	0.081
1	0.1	-0.366263	0.000142	3.884e-04	3.38	0.00510	-0.366303	0.000209	5.696e-04	2.85	0.00924	0.552
1	1	-0.356208	0.000123	3.447e-04	10.10	0.01200	-0.356422	0.000213	5.978e-04	7.07	0.02525	0.475
1	3	-0.335460	0.000117	3.497e-04	27.58	0.03373	-0.335805	0.000220	6.550e-04	18.62	0.07988	0.422
1	10	-0.277008	0.000127	4.588e-04	127.77	0.26892	-0.276743	0.000228	8.238e-04	73.24	0.49708	0.541
3	0.1	-0.219155	0.000153	7.000e-04	5.51	0.02701	-0.219186	0.000221	1.007e-03	3.39	0.03438	0.785
3	1	-0.209308	0.000144	6.866e-04	12.76	0.06017	-0.209426	0.000218	1.040e-03	6.16	0.06663	0.903
3	3	-0.190219	0.000132	6.965e-04	29.96	0.14535	-0.190411	0.000210	1.105e-03	12.84	0.15674	0.927
3	10	-0.143645	0.000112	7.806e-04	105.20	0.64103	-0.143690	0.000183	1.275e-03	39.69	0.64528	0.993
10	0.1	-0.071424	0.000081	1.130e-03	8.66	0.11055	-0.071358	0.000119	1.664e-03	3.37	0.09331	1.185
10	1	-0.068768	0.000077	1.116e-03	13.11	0.16317	-0.068664	0.000115	1.670e-03	4.46	0.12454	1.310
10	3	-0.063507	0.000070	1.099e-03	22.45	0.27110	-0.063321	0.000106	1.682e-03	6.88	0.19467	1.393
10	10	-0.050786	0.000054	1.061e-03	52.92	0.59544	-0.050710	0.000085	1.676e-03	15.53	0.43595	1.366

TABLE E.1 – Estimation, absolute and relative standard deviations, computation time (s) for 10^6 independent realizations and computation time (s) for a 1% statistical uncertainty as a function of ζ , $k_{a,max}L$ and $k_{s,max}L$. The last column compares the $\zeta = 0.1$ and $\zeta = 1$ computation time to get a 1% standard deviation. This computation was done with an "Intel i5 - 2.4GHz" CPU without any parallelization, for $\rho = 1$, $\varepsilon = 1$ and $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$. The computation times for a 1% standard deviation are obtained by multiplying t by $\left(\frac{\sigma_{rel}}{0.01}\right)^2$.

column in each table displays the ratio of the time required to reach a one percent relative accuracy with our algorithm to the time required to reach a one percent relative accuracy with the algorithm of [Galtier *et al.*, 2013]. A first conclusion is that our algorithm is faster for small values of the absorption optical-thickness and is slower otherwise. However, when we are slower it is only of a factor 3 and for very thick media. Considering that the occurrence of small absorption optical-thicknesses is quite common in combustion applications, the new algorithm can be retained systematically for validation purposes. For other simulation objectives where the computation times are of primary importance, for instance when Monte Carlo solvers are coupled to fluid-mechanics and chemistry, it may be useful to switch from one algorithm to the other, by simply changing ζ in the code, as function of an a priori evaluation of the optical-thickness. Simulations performed with reflective surfaces confirm this first practical conclusion, only with a higher sensitivity to the value of ζ . In the above tables we used either $\zeta = 1$ or $\zeta = 0.1$, but changing ζ to 10^{-2}

Optical thickness		$\zeta = 0.1$						$\zeta = 1$						ratio
$k_{a,max}L$	$k_{s,max}L$	$\frac{A}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}}$	σ_{rel}	t	$t_{1\%}$		$\frac{A}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_a(\mathbf{x}_0)f_{max}}$	σ_{rel}	t	$t_{1\%}$		$\frac{t_{1\%}(\zeta=0.1)}{t_{1\%}(\zeta=1)}$
0.1	0.1	-0.977195	0.000081	8.310e-05	2.24	0.00016		-0.977282	0.000127	1.303e-04	2.21	0.00038		0.413
0.1	1	-0.976700	0.000041	4.212e-05	6.19	0.00011		-0.976632	0.000130	1.328e-04	6.04	0.00107		0.103
0.1	3	-0.975783	0.000035	3.586e-05	15.17	0.00020		-0.976059	0.000132	1.351e-04	14.52	0.00265		0.074
0.1	10	-0.974777	0.000042	4.354e-05	46.19	0.00088		-0.974918	0.000137	1.404e-04	43.02	0.00849		0.103
1	0.1	-0.821998	0.000285	3.466e-04	3.31	0.00398		-0.821889	0.000325	3.948e-04	2.24	0.00350		1.138
1	1	-0.821967	0.000237	2.879e-04	8.34	0.00692		-0.821963	0.000326	3.970e-04	4.88	0.00771		0.897
1	3	-0.823956	0.000215	2.606e-04	17.71	0.01202		-0.823910	0.000329	3.993e-04	10.52	0.01678		0.717
1	10	-0.839442	0.000220	2.620e-04	46.75	0.03208		-0.839106	0.000328	3.903e-04	25.32	0.03859		0.831
3	0.1	-0.657423	0.000388	5.896e-04	4.23	0.01471		-0.657905	0.000408	6.196e-04	2.15	0.00826		1.782
3	1	-0.664806	0.000365	5.497e-04	9.43	0.02851		-0.664684	0.000410	6.167e-04	3.57	0.01357		2.101
3	3	-0.679347	0.000345	5.082e-04	16.61	0.04289		-0.679790	0.000412	6.062e-04	6.48	0.02382		1.801
3	10	-0.723130	0.000327	4.524e-04	34.46	0.07053		-0.723957	0.000410	5.668e-04	13.95	0.04482		1.574
10	0.1	-0.544147	0.000480	8.452e-04	3.72	0.02660		-0.543517	0.000462	5.018e-04	1.91	0.01384		1.922
10	1	-0.551601	0.000452	8.189e-04	7.88	0.05288		-0.551251	0.000463	8.405e-04	2.42	0.01711		3.089
10	3	-0.568200	0.000438	7.706e-04	10.89	0.06467		-0.567614	0.000465	8.193e-04	3.45	0.02317		2.791
10	10	-0.611147	0.000411	6.723e-04	19.32	0.08731		-0.609870	0.000465	7.632e-04	6.50	0.03787		2.305

TABLE E.2 – Estimation, absolute and relative standard deviations, computation time (s) for 10^6 independent realizations and computation time (s) for a 1% statistical uncertainty as a function of ζ , $k_{a,max}L$ and $k_{s,max}L$. The last column compares the $\zeta = 0.1$ and $\zeta = 1$ computation time to get a 1% standard deviation. This computation was done with an "Intel i5 - 2.4GHz" CPU without any parallelization, for $\rho = 1$, $\varepsilon = 1$ and $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$. The computation times for a 1% standard deviation are obtained by multiplying t by $\left(\frac{\sigma_{rel}}{0.01}\right)^2$.

or even 10^{-5} changes very little the computation times. This can be expected, as encountering the black surfaces always reduces the path-extinction to zero and the extinction criterion is reached whatever the value of ζ . **Fig. E.3** and **Fig. E.4** display such ζ -dependencies for perfectly reflective ($\varepsilon = 0$) and perfectly absorptive surfaces ($\varepsilon = 1$) respectively, indicating that a knowledgeable choice is $\zeta = 0.1$ (as we used in the tables).

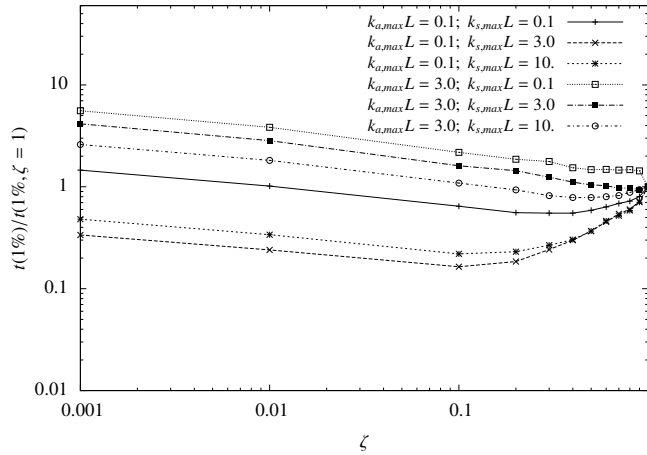


FIGURE E.3 – Time to reach a 1% standard deviation as a function of ζ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$, for $\varepsilon = 0$ and $\hat{k} = k_{a,max} + k_{s,max}$.

Finally, we have already mentioned that the algorithm deals theoretically with unexpected occurrences of $k_n < 0$ at some locations. However this is at the price of correcting the Monte Carlo weight in a way that increases the variance, increasing therefore the required number of realizations to reach a given accuracy. This is explored in **Fig. E.5** and **Fig. E.6** that display the number of realizations required to reach a one percent relative accuracy, as function of ρ , that is to say as function

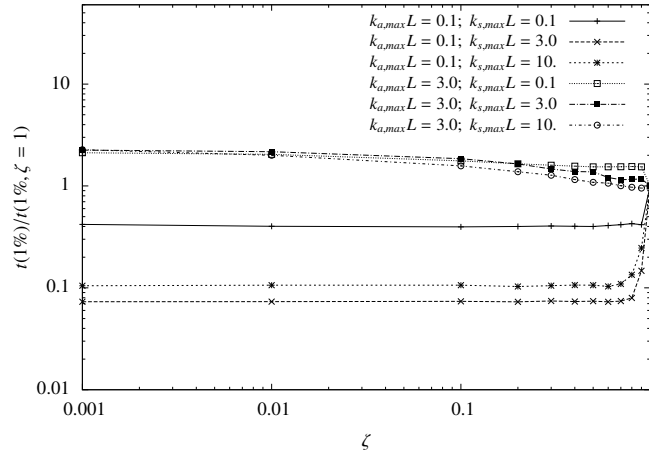


FIGURE E.4 – Time to reach a 1% standard deviation as a function of ζ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$, for $\varepsilon = 1$ and $\hat{k} = k_{a,max} + k_{s,max}$.

of the amount of negative null-collisions. Simulation results are given for $\zeta = 1$ and $\zeta = 0.1$ in order to evaluate whether the new algorithm encounters more or less convergence difficulties when \hat{k} is locally lower than the total extinction coefficient. We concentrate on the location $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$ as it was identified as the most

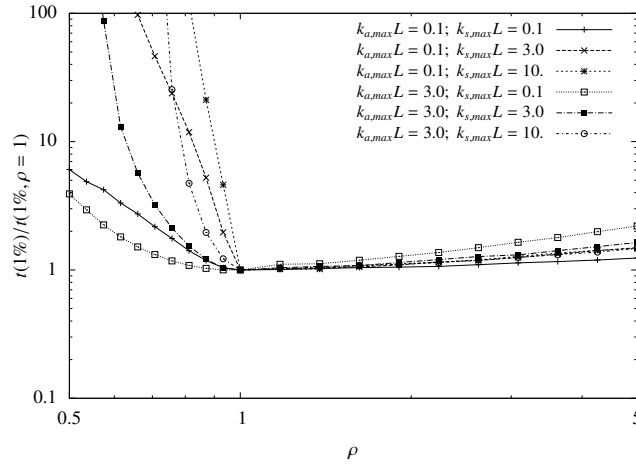


FIGURE E.5 – Time to reach a 1% standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$ for $\varepsilon = 1$ and $\zeta = 1$.

pathological condition : the starting point of all rays is right inside the region where $\hat{k} < k$ (the negative null-collision region). Obviously the main trends of our algorithm are identical to those of [Galtier *et al.*, 2013] only observing that

- we encounter more convergence difficulties when the negative null-collision region is optically thin in absorption and optically thick in scattering
- when the medium is optically thin both in absorption and scattering, increasing the number of null-collisions decreases the 1%-accuracy computation-time, because the repeated computations of the absorption contributions lead to a quasi-deterministic integration along the path, which reduces significantly the

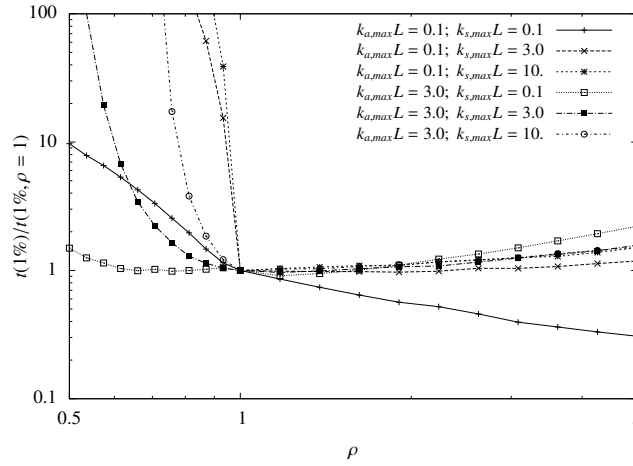


FIGURE E.6 – Time to reach a 1% standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$ for $\varepsilon = 1$ and $\zeta = 0.1$.

variance (more than it increases the computation-time), just as expected in standard energy partitioning approaches.

E.5 Production of reference solutions for PRISSMA validation

The objective of the Monte Carlo algorithm proposed in [Sec. E.3](#) is essentially to produce reference solutions against which faster radiative transfer solvers can be validated. We here take the example of validating the PRISSMA solver that is implemented for representation of infrared radiative sources in AVBP (a parallel CFD code for reactive unsteady flow simulations on hybrid grids⁴). We retain a configuration that was studied by Knikker et al. [[Knikker et al., 2000](#), [Knikker et al., 2002](#), [Nottin et al., 2000](#)]. The dimensions of the chamber are the following (see [Fig. E.7](#) for axis conventions) : 50mm along the Y-axis, 80mm along the Z-axis and 300mm along the X-axis. A triangular flame hook is located on lateral sides, at a height of 25mm.

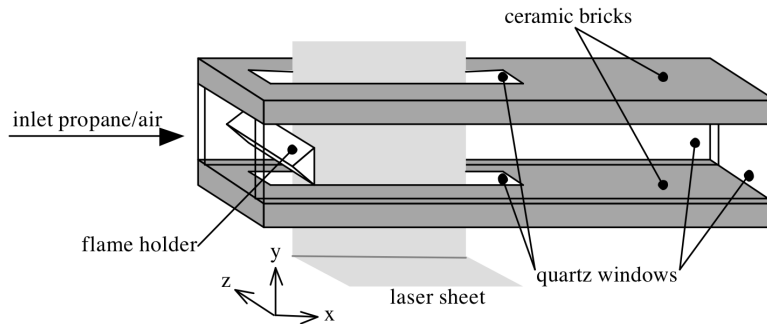


FIGURE E.7 – Representation of the dihedral combustion chamber.

A air/propane mixture is injected from the left-hand side, and a V-shaped flame

4. <http://www.cerfacs.fr/4-26334-The-AVBP-code.php>

develops in the rectangular tube along the X-axis. Wall temperature is fixed to 300K everywhere, except for outlet walls that have been set at 1900K, the temperature of exhaust gases. As far as radiative properties are concerned, all boundaries are modeled as grey interfaces. The ceramic wall emissivity is set at $\varepsilon=0.91$. That of quartz windows is $\varepsilon = 0.87$. The flame holder emissivity is $\varepsilon=0.40$, corresponding to a stainless steel lightly oxidized at 1000 K. The inlet, the outlet and the atmosphere are assumed to behave as black surfaces.

AVBP was run using a time averaged LES [Poitou, 2009, Poitou *et al.*, 2011], leading to the fields of temperature and species concentrations displayed in Fig. E.8. The

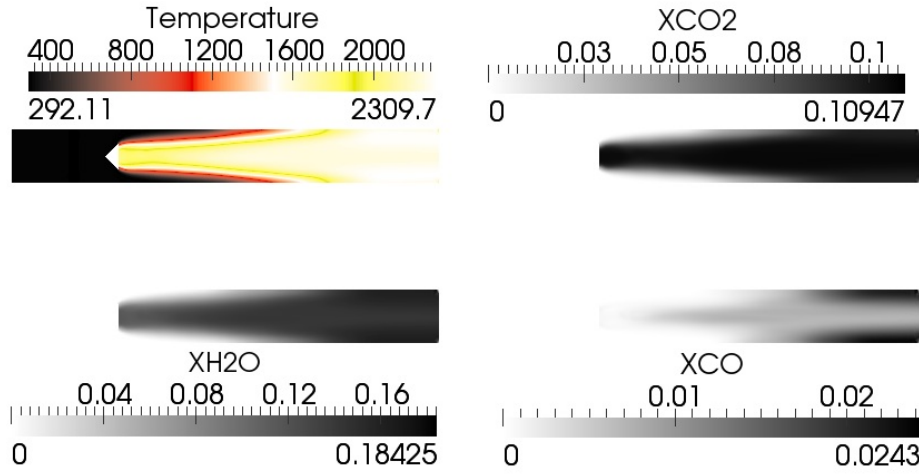


FIGURE E.8 – Visualization of the temperature field (K), CO_2 concentration field (molar fraction), H_2O concentration field (molar fraction) and CO concentration field (molar fraction) within the dihedral combustion chamber.

radiative transfer solver embedded in AVBP, and therefore involved in the production of these fields, is PRISSMA [Poitou *et al.*, 2012]. It has been specifically designed for combustion applications. Based on a Discrete Ordinate Method [Joseph *et al.*, 2005], it is designed to reach a satisfactory compromise between accuracy and computational costs. The radiative budget is determined in the whole volume using a specific grid, coarser than the LES one. The associated strategy for the coupling with AVBP is detailed in [Poitou *et al.*, 2012]. The angular quadrature chosen here is an S4. The full spectrum model (FSK) is used for spectral integration using 15 quadrature points [Poitou *et al.*, 2011].

In order to meet the requirements of AVBP in terms of computation requirements, the spatial and angular discretizations as well as the FSK spectral integration procedure were tuned at the extreme limits of their validity ranges, and it is therefore required that PRISSMA is validated against a reference radiative transfer solver each time a new combustion configuration is considered. This task is here achieved using the Monte Carlo algorithm of Sec. E.3, implemented within the EDStaR development environment, using the Mcm3D library [De La Torre *et al.*, 2014, Starwest, 2014a]. This implementation deals with three-dimension geometries using advanced computer-

graphics tools. The input fields are the output of AVBP. Unlike in the benchmark simulations of Sec. E.4 where the input fields were analytic, the input fields are now provided using the LES grid of AVBP (4.74 million tetrahedrons) together with an interpolation procedure provided by the combustion specialists to reflect the spatial integration schemes involved in the fluid mechanics and chemistry solvers. As radiative transfer specialists, we therefore make no choice : we strictly accept what would be, ideally, the input fields that PRISSMA should reflect, in its coupling with AVBP, if no computation constraint was taken into account. Ideally, along the same line, our Monte Carlo simulations should use the best gaseous line-absorption properties available, i.e. the detailed line profiles provided by spectroscopic databases such as HITEMP [Rothman *et al.*, 2010] and CSD [Tashkun *et al.*, 2011]. However, at the present stage, only few attempts were reported in which such line-by-line Monte Carlo strategies were tested and none of them are compatible with our requirements in terms of three-dimension geometry and heterogeneity. As described in Sec. E.3.3, our “reference” simulation makes therefore only use of a narrow band k-distribution strategy. The corresponding spectral data were produced using the SNB-ck approach of [Soufiani *et al.*, 1997, Liu *et al.*, 2000, Liu *et al.*, 2001, Joseph *et al.*, 2009], separating CO_2 and H_2O thanks a decorrelation assumption described at the end of Sec. E.3.3. 367 spectral narrowbands are used, each of width $\Delta\nu=25\text{ cm}^{-1}$, and the discrete-k sets are constructed in accordance with a Gauss-Legendre quadrature of order 7.

Altogether, in the validation exercise reported here, the objective was to validate PRISSMA in which

- spatial integration relies on an adapted grid, coarser than the LES grid of AVBP, at the limits of the validity of spatial integration criteria (which will lead to unsmooth simulation results),
- angular discretization is reduced to a S4 quadrature,
- spectral integration is performed using only 15 FSK-quadrature points,

and we validate it against a Monte Carlo solver that

- uses the LES input fields,
- makes no approximation as far as angular integration is concerned,
- and uses a narrow-band discretization together with a k-distribution model for spectral integration.

The main advantage of null-collisions was that the Monte Carlo solver could be designed completely independently of the LES grid structure. It can therefore be immediately used for validation of other configurations in which AVBP is run with another spatial-discretization strategy, or for validation of radiative solvers embedded in other combustion solvers (Fig. E.9).

Typical results of this validation exercise are illustrated in Fig. E.10, where radiative budgets (W/m^3) are presented along the X-axis ($y=0, z=0, x \in [0;0.3]$ m) and along the Y-axis ($x=0.08, y \in [-0.025;0.025]$ m, $z=0$). They reflect what would globally be interpreted as a good agreement in the combustion simulation context. PRISSMA and Mcm3D do not differ by more than a few percent in the regions where radiative source terms are high. In the flame edges that are cold regions where

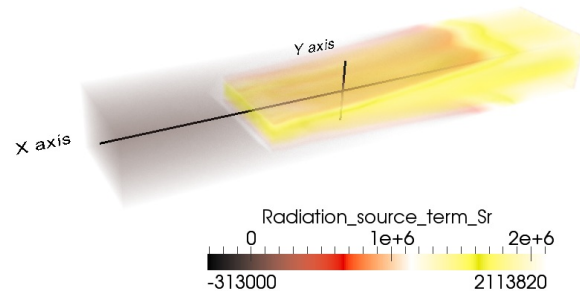


FIGURE E.9 – Visualization of the radiative budget (W/m^3) within the dihedral combustion chamber.

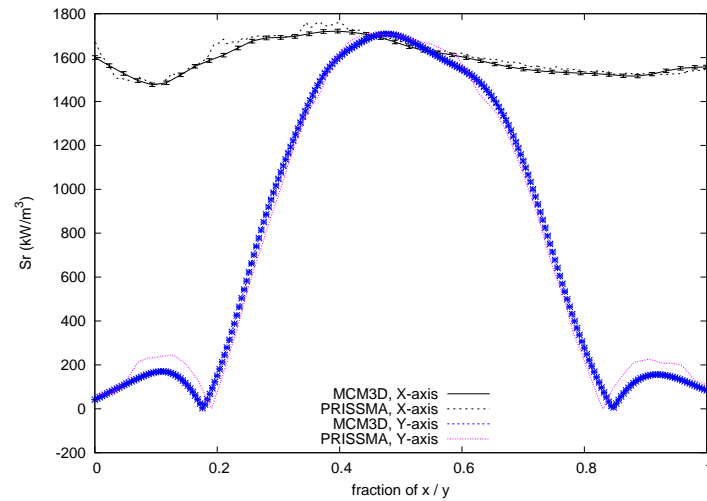


FIGURE E.10 – Radiative budget (kW/m^3) along the X-axis (at position $y=0$, $z=0$) and along the Y-axis of the combustion chamber (at position $x=0.08\text{m}$, $z=0$).

the radiative source term is small, the results show significant discrepancies. In such zones the radiative species are more absorbing than emitting, and the accuracy of the solution is probably more sensitive to the DOM angular discretization. But such discrepancies have been shown to have little influence on the overall combustion simulation. In any case, provided that we assume that our narrow band model is sufficiently accurate, the Monte Carlo solution can be interpreted as the exact solution (within the statistical error bars) of the radiative transfer equation for the input fields that combustion specialists define as the complete continuous fields corresponding to the AVBP output. The question of interpreting the discrepancies between PRISSMA and Mcm3D is therefore only a question of validating or invalidating the compromises made in the DOM simulation to meet AVBP's requirements in terms of computation times. Combustion specialists are then in the position of refining the PRISSMA grid, increasing the angular quadrature order, increasing the FSK quadrature order, as function of the assumed sensitivity of their fluid mechanics/chemistry results to the radiative-transfer source-field.

Coming back to the validation tool itself, and thinking of the benchmark simulation results of [Sec. E.4](#), it is worth mentioning here that the computation time is highly dependent on the numerical optimization of the localization/interpolation procedure. All the null-collision algorithm needs, in order to deal with AVBP fields, is a function that takes the three geometrical coordinates as input and provides the local values of temperature, pressure and concentrations. This procedure needs to detect the tetrahedron to which the location belongs, and then apply an interpolation procedure compatible with AVBP's numerical assumptions (here a standard barycentric 3D interpolation [[Pharr et Humphreys, 2010](#)]). All CFD simulation environments provide such functions, at least for post-treatment purposes. But the corresponding numerics can be extremely slow because post-treatments are not looped into iterative algorithms. In our Monte Carlo algorithm, we need to call this function at each collision event. Therefore the computation times are very sensitive to the numerics of the localization and interpolation procedure. Then the question becomes the following : as the Monte Carlo code is only used for validation purposes, one may use post-treatment tools without much concern (relying on parallelization to speed-up the Monte Carlo simulation), but if validation exercises are to be launched in a quite systematic manner, then localization/interpolation becomes an issue. Typically, in the above example, when using a localization/interpolation function extracted from post-treatment tools, the computation times needed to reach a 1% uncertainty were as high as four hours on a single processor, whereas the same simulation (using the same interpolation function) was reduced to 40 seconds using standard acceleration-grids [[Pharr et Humphreys, 2010](#), [Fujimoto et al., 1986](#)] to speed up the localization among the 4.74 millions tetrahedrons. In summary, dealing with three-dimension geometry and spectral integration rises the computation times from several seconds, as in [Sec. E.4](#), to several tens of seconds, but without caring about the quality of the localization/interpolation procedure, a jump is made up to several hours.

Note finally that CFD simulation environments may provide optimized localization/interpolation tools if they address the question of the flow transporting solid or liquid particles, because for different reasons they have the same need to establish

the correspondence between the location of a particle and the characteristics of the flow it encounters.

E.6 Conclusion

Validating the radiative transfer solvers embedded in combustion simulation codes is an important issue. These solvers need to be very fast, which leads the developers to play, as finely as possible, with the limits of validity of the retained numerical techniques. This is particularly true as far as absorption line-spectra representation and phase-space discretization are concerned. It is therefore essential that the corresponding numerical parameters be adjusted to each new combustion configuration, or at least that their effect be controlled each time a new configuration is addressed. From this point of view, the fact that Monte Carlo solvers deal now easily with complex geometries is a key element. We essentially benefit of the advances of the computer graphics community : path-tracking algorithms are now sufficiently efficient and easy-to-handle to meet our needs. Starting from the geometric CAD file of a new combustion chamber and sampling optical paths in the corresponding complex geometry is now ready-for-use. For Monte Carlo codes to be implemented that could easily deal with all the diversity of combustion codes and the diversity of combustion configurations, the missing point is therefore only the representation of the temperature, pressure and concentration fields. In each new context, these fields are provided under different mathematical forms, with different formats, and it is nearly required to design a new Monte Carlo code for each new combustion-code validation exercise.

The algorithm presented in the present article was meant as a contribution to such today's researches. The initial idea was to explore a technical solution used in neutron and electron-transport physics to deal with heterogeneous fields : the introduction of null-collisions, that change nothing to the transport of particles, but that can be tuned so that the total extinction coefficient becomes homogeneous (or easy to handle). This idea was addressed theoretically in [[Galtier et al., 2013](#)] and we here explored its practical meaning in the combustion-simulation context. We reach the conclusion that null-collision Monte Carlo algorithms are well suited. Combustion specialists wishing to validate their radiative solver have nothing more to provide than a function interpolating their grid point simulation results to give the temperature, pressure and concentrations at any given location. This commonly implies a localization procedure (typically to determine what tetrahedron the considered location belongs to) and an interpolation procedure in accordance with the spatial schemes used in their fluid mechanics and chemistry codes. This last point is essential in order to make sure that the continuous input fields provided to the Monte Carlo solver are correct representations of the numerical assumptions made within the combustion code. Usually, such localization and interpolation routines are available, at least for the post-treatment of combustion simulation results. They can however be extremely slow, which can be a source of difficulty if the number of required validation exercises is high. We saw, in the last section, that the Monte Carlo computation times can rise from less than a minute to a few hours when switching to a very slow localization procedure, but these computation times were given without the use of any parallel

hardware. Few hours may then sound very much acceptable for only a validation exercise. Otherwise, as we illustrated it, some additional efforts can be made to build a better optimized localization procedure, considering that it is meant to be used for each of the very numerous collision locations sampled in the Monte Carlo algorithm. This simply implies using acceleration grids but will only be required if validation exercises are frequently repeated.

By comparison with [Galtier *et al.*, 2013], we upgraded the algorithm in order to follow the path continuously and only exit after absorption when an extinction criterion is reached. This upgrade, that involves a quite limited number of algorithmic changes, is particularly meaningful in the combustion context because combustion chambers are commonly optically quite thin at most frequencies, and path-continuation reduces significantly the required computation times, for a given accuracy, in the optically thin limit. In thicker conditions, our new proposition may be worse than the initial one, but then the computation-time increase is only limited. So, when we are faster, the gain can be very significant, and when we are slower, the loss is limited. We therefore conclude that our new algorithm is worth being preferred systematically to that of [Galtier *et al.*, 2013], except in contexts where the computational constraints are high and justify that ζ is adapted to the values of both the scattering and absorption optical thicknesses.

Finally, as in [Galtier *et al.*, 2013], the algorithm is designed to allow the occurrence of negative null-collisions. Of course this is at the price of an increased variance. But pathological behaviors are only encountered when the region of negative null-collisions is optically thick with a high single scattering albedo. Again, optically thick scattering is quite rare among combustion configurations and the \hat{k} field can therefore be chosen without caring too much about the risk that, because of the non-linear dependence of absorption coefficients with temperature, \hat{k} is not a rigorous upper bound to k at all locations.

E.7 Acknowledgments

The research presented in this paper was conducted with the support of the STRASS project funded by the *Fédération Recherche Aéronautique et Espace* (FRAE). V.E. also acknowledges support from the European Research Council (Starting Grant 209622 : E3ARTHS).

Bibliographie

- [André *et al.*, 2014] ANDRÉ, F., SOLOVJOV, V. P., EYMET, V. et CALIOT, C. (2014). Rayonnement des gaz : des spectres de raies aux modèles approchés. *Ecole Thématique CNRS "Rayonnement thermique en milieux semi-transparents"*.
- [André et Vaillon, 2010] ANDRÉ, F. et VAILLON, R. (2010). A nonuniform narrow band correlated-k approximation using the k-moment method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(12-13):1900–1911.
- [André et Vaillon, 2012] ANDRÉ, F. et VAILLON, R. (2012). Generalization of the k-moment method using the maximum entropy principle. Application to the NBKM and full spectrum SLMB gas radiation models. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 113(12):1508–1520.
- [Andreucci, 1985] ANDREUCCI, N. (1985). Adjoint Monte-Carlo method with fictitious scattering in deep penetration and long-distance detector calculations. *Lecture Notes in Physics*, 240:291–300.
- [Androsenko *et al.*, 1991] ANDROSENKO, A., ANDROSENKO, P. et PUPKO, S. (1991). Solution of transport equations by the Monte Carlo Method, Taking account of the space-time variation in the interaction cross section. *Soviet Atomic Energy*, 70(2):91–96.
- [Arrhenius, 1896] ARRHENIUS, S. (1896). On the Influence of Carbonic Acid in the Air upon the Temperature of the Ground. *London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 41:237–275.
- [Assaraf et Caffarel, 1999] ASSARAF, R. et CAFFAREL, M. (1999). Zero-variance principle for monte carlo algorithms. *Physical review letters*, 83(23):4682.
- [Badal et Badano, 2009] BADAL, A. et BADANO, A. (2009). Monte Carlo simulation of X-ray imaging using a graphics processing unit. In *2009 IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*, pages 4081–4084.
- [Bézar *et al.*, 1990] BÉZARD, B., BERGH, C. D., CRISP, D. et MAILLARD, J. (1990). The deep atmosphere of Venus revealed by high-resolution nightside spectra. *Nature*, 345:508–511.
- [Blanco *et al.*, 2014] BLANCO, S., DAUCHET, J., EL HAFI, M. et FOURNIER, R. (2014). Physique de l'équation de transfert radiatif en milieu semi-transparent. *Ecole Thématique CNRS "Rayonnement thermique en milieux semi-transparents"*.

- [Boeuf et Marode, 1982] BOEUF, J. et MARODE, E. (1982). A Monte Carlo analysis of an electron swarm in a nonuniform field : the cathode region of a glow discharge in helium. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 15:2169–2187.
- [Boulet *et al.*, 2014] BOULET, P., COLLIN, A., MERCHERS, O. et VAILLON, R. (2014). Propriétés radiatives des milieux diffusants. *Ecole Thématique CNRS "Rayonnement thermique en milieux semi-transparentes"*.
- [Brennan, 1991] BRENNAN, M. (1991). Optimization of Monte Carlo codes using null collision techniques for experimental simulation at low E/N. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 19(2):256–261.
- [Brown et Martin, 2003] BROWN, F. B. et MARTIN, W. (2003). Direct sampling of Monte Carlo flight paths in media with continuously varying cross-sections. In *In Proc. ANS Mathematics and Computation Topical Meeting (Vol2)*.
- [Burch *et al.*, 1969] BURCH, D. E., GRYVNAK, D. A., PATTY, R. R. et BARTKY, C. E. (1969). Absorption of Infrared Radiant Energy by CO₂ and H₂O. IV. Shapes of Collision-Broadened CO₂ Lines. *Journal of the Optical Society of America*, 59(3):267–278.
- [Caliot, 2006] CALIOT, C. (2006). *Simulation de l'émission énergétique et spectrale d'un jet réactif composé de gaz et de particules à haute température issus de la combustion d'un objet pyrotechnique*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse - Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [Case, 1957] CASE, K. (1957). Transfer Problems and the Reciprocity Principle. *Reviews of Modern Physics*, 29(4):651–663.
- [Cercignani, 1988] CERCIGNANI, C. (1988). *The Boltzmann Equation and Its Applications*, volume 67 de *Applied Mathematical Sciences*. Springer New York.
- [Cerfacs, 2014] CERFACS (2014). The AVBP Code, <http://www.cerfacs.fr/4-26334-The-AVBP-code.php>.
- [Chandrasekhar, 1960] CHANDRASEKHAR, S. (1960). *Radiative transfer*. Dover Publications.
- [Chandrasekhar, 1963] CHANDRASEKHAR, S. (1963). *An introduction to the study of stellar structure*. Courier Dover Publications.
- [Cho, 2008] CHO, E. (2008). Variance of Sample Variance. *Section on Survey Research Methods – JSM*, 2:1291–1293.
- [Coleman, 1968] COLEMAN, W. (1968). Mathematical Verification of a Certain Monte Carlo Sampling Technique and Applications of the Technique to Radiation Transport Problems. *Nuclear science and engineering*, 32:76–81.
- [Dauchet, 2012] DAUCHET, J. (2012). *Analyse radiative des photobioréacteurs*. Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal - Clermont II.
- [Dauchet *et al.*, 2013] DAUCHET, J., BLANCO, S., CORNET, J.-F., EL HAFI, M., EYMET, V. et FOURNIER, R. (2013). The practice of recent radiative transfer Monte Carlo advances and its contribution to the field of microorganisms cultivation in photobioreactors. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 128:52–59.

- [De Guilhem De Lataillade *et al.*, 2002a] DE GUILHEM DE LATAILLADE, A., BLANCO, S., CLERGENT, Y., DUFRESNE, J.-I. et EL HAFI, M. (2002a). Monte Carlo method and sensitivity estimations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75:529–538.
- [De Guilhem De Lataillade *et al.*, 2002b] DE GUILHEM DE LATAILLADE, A., DUFRESNE, J.-L., EL HAFI, M., EYMET, V. et FOURNIER, R. (2002b). A net-exchange Monte Carlo approach to radiation in optically thick systems. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 74:563–584.
- [De La Torre *et al.*, 2014] DE LA TORRE, J., BAUD, G., BÉZIAN, J.-J., BLANCO, S., CALIOT, C., CORNET, J.-F., COUSTET, C., DAUCHET, J., EL HAFI, M., EYMET, V., FOURNIER, R., GAUTRAIS, J., GOURMEL, O., JOSEPH, D., MEILHAC, N., PAJOT, A., PAULIN, M., PEREZ, P., PIAUD, B., ROGER, M., ROLLAND, J., VEYNANDT, F. et WEITZ, S. (2014). Monte Carlo advances and concentrated solar applications. *Solar Energy*, 103:653–681.
- [Dunn et Shultis, 2012] DUNN, W. L. et SHULTIS, J. K. (2012). *Exploring Monte Carlo Methods*. Elsevier.
- [Eymet, 2011a] EYMET, V. (2011a). ACN MCM pour transfert radiatif. Rapport technique.
- [Eymet, 2011b] EYMET, V. (2011b). KSPECTRUM version 1.0.7 User Manual.
- [Eymet, 2013] EYMET, V. (2013). Modélisation de spectres synthétiques d'un mélange de gaz. Rapport technique, Laboratoire RAPSODEE - Mines Albi - Université de Toulouse.
- [Eymet *et al.*, 2004] EYMET, V., DUFRESNE, J.-I., RICCHIAZZI, P., FOURNIER, R. et BLANCO, S. (2004). Long-wave radiative analysis of cloudy scattering atmospheres using a net exchange formulation. *Atmospheric Research*, 72(1-4):239–261.
- [Eymet *et al.*, 2005] EYMET, V., FOURNIER, R., BLANCO, S. et DUFRESNE, J.-I. (2005). A boundary-based net-exchange Monte Carlo method for absorbing and scattering thick media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 91(1):27–46.
- [Eymet *et al.*, 2009] EYMET, V., FOURNIER, R., DUFRESNE, J.-I., LEBONNOIS, S., HOURDIN, F. et BULLOCK, M. A. (2009). Net exchange parameterization of thermal infrared radiative transfer in Venus' atmosphere. *Journal of Geophysical Research*, 114(E11).
- [Eymet *et al.*, 2013] EYMET, V., POITOU, D., GALTIER, M., EL HAFI, M., TERRÉE, G. et FOURNIER, R. (2013). Null-collision meshless Monte-Carlo—Application to the validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 129:145–157.
- [Farges, 2014] FARGES, O. (2014). *Conception optimale de centrales solaires à concentration : application aux centrales à tour et aux installations « beam down »*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse.
- [Farmer et Howell, 1998] FARMER, J. T. et HOWELL, J. R. (1998). Comparison of Monte Carlo strategies for radiative transfer in participating media. *Advances in heat transfer*, 31:333–429.

- [Feldick et Modest, 2011] FELDICK, A. et MODEST, M. F. (2011). An improved wavelength selection scheme for Monte Carlo solvers applied to hypersonic plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(8):1394–1401.
- [Fischer et al., 2003] FISCHER, J., GAMACHE, R. R., GOLDMAN, A., ROTHMAN, L. S. et PERRIN, A. (2003). Total internal partition sums for molecular species in the 2000 edition of the HITRAN database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 82(1-4):401–412.
- [Fomin, 2006] FOMIN, B. A. (2006). Monte-Carlo algorithm for line-by-line calculations of thermal radiation in multiple scattering layered atmospheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 98(1):107–115.
- [Forestier et al., 2008] FORESTIER, B., MISS, J., BERNARD, F. et DORVAL, A. (2008). Criticality calculations on pebble-bed HTR-PROTEUS configuration as a validation for the pseudo-scattering tracking method implemented in the MORET 5 Monte Carlo. In *International Conference on the Physics of Reactors*, pages 761–768.
- [Fournier et El Hafi, 2010] FOURNIER, R. et EL HAFI, M. (2010). Physique du rayonnement (Cours Master 2 Recherche).
- [Fraunhofer, 1817] FRAUNHOFER, J. (1817). Bestimmung des Brechungs-und Farbenzerstreuungs-Vermögens verschiedener Glasarten in Bezug auf die Vervollkommnung achromatischer Fernrohre. *Annalen der Physik*, 56(7):264–313.
- [Fujimoto et al., 1986] FUJIMOTO, A., TANAKA, T. et IWATA, K. (1986). Arts : Accelerated ray-tracing system. *Computer Graphics and Applications, IEEE*, 6(4):16–26.
- [Galtier et al., 2013] GALTIER, M., BLANCO, S., CALIOT, C., COUSTET, C., DAUCHET, J., EL HAFI, M., EYMET, V., FOURNIER, R., GAUTRAIS, J., KHUONG, A., PIAUD, B. et TERRÉE, G. (2013). Integral formulation of null-collision Monte Carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 125:57–68.
- [Gardon, 1958] GARDON, R. (1958). Study of the thermal history of glass plates during tempering. In *Symposium sur la fusion du verre, Bruxelles*.
- [Goody et al., 1989] GOODY, R., WEST, R., CHEN, L. et CRISP, D. (1989). The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 42(6):539–550.
- [Goody et Yung, 1996] GOODY, R. et YUNG, Y. (1996). *Atmospheric radiation : theoretical basis*. Oxford University Press.
- [Gruszka et Borysow, 1997] GRUSZKA, M. et BORYSOW, A. (1997). Roto-Translational Collision-Induced Absorption of CO₂ for the Atmosphere of Venus at Frequencies from 0 to 250 cm⁻¹, at Temperatures from 200 to 800 K. *Icarus*, 129(1):172–177.
- [Hammersley et al., 1965] HAMMERSLEY, J. M., HANDSCOMB, D. C. et WEISS, G. (1965). *Monte Carlo Methods*. London : Methuen.
- [Hartmann et al., 2008] HARTMANN, J.-M., HARTMANN, J.-M., BOULET, C., BOULET, C., ROBERT, D. et ROBERT, D. (2008). *Collisional Effects on Molecular Spectra*. Elsevier.

- [Heifetz *et al.*, 1982] HEIFETZ, D., POST, D. et PETRAVIC, M. (1982). A Monte Carlo Model of Neutral Particle Transport In Diverted Plasmas. *Journal of Computational Physics*, 46(2):309–327.
- [Heitler, 2010] HEITLER, W. (2010). *The Quantum Theory of Radiation*. Dover Publications, 3rd édition.
- [Hoogenboom, 2008] HOOGENBOOM, J. E. (2008). Zero-Variance Monte Carlo Schemes Revisited. *Nuclear science and Engineering*, 160:1–22.
- [Howell, 1969] HOWELL, J. R. (1969). Application of Monte Carlo to Heat Transfer Problems. *Advances in heat transfer*, 5:1–54.
- [Howell, 1998] HOWELL, J. R. (1998). The Monte Carlo method in radiative heat transfer. *Journal of Heat Transfer*, 120(3):547–560.
- [Howell et Perlmutter, 1964a] HOWELL, J. R. et PERLMUTTER, M. (1964a). Monte Carlo solution of radiant heat transfer in a nongrey nonisothermal gas with temperature dependent properties. *AIChE Journal*, 10(4):562–567.
- [Howell et Perlmutter, 1964b] HOWELL, J. R. et PERLMUTTER, M. (1964b). Monte Carlo solution of thermal transfer through radiant media between gray walls. *Journal of heat transfer*, 86:116–122.
- [Hulst, 1980] HULST, H. V. D. (1980). *Multiple Light Scattering : Tables, Formulas and Applications, vols. 1 and 2*. Academic Press, New York.
- [Humlicek, 1982] HUMLICEK, J. (1982). Optimized computation of the voigt and complex probability functions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 27(4):437–444.
- [Jacquinet-Husson *et al.*, 2011] JACQUINET-HUSSON, N., CREPEAU, L., ARMANTE, R., BOUTAMMINE, C., CHÉDIN, a., SCOTT, N. A., CREVOISIER, C., CAPELLE, V., BOONE, C., POULET-CROVISIER, N., BARBE, a., CAMPARGUE, A., CHRIS BENNER, D., BENILAN, Y., BÉZARD, B., BOUDON, V., BROWN, L. R., COUDERT, L., COUSTENIS, a., DANA, V., DEVI, V., FALLY, S., FAYT, a., FLAUD, J.-M., GOLDMAN, A., HERMAN, M., HARRIS, G., JACQUEMART, D., JOLLY, a., KLEINER, I., KLEINBÖHL, a., KWABIA-TCHANA, F., LAVRENTIEVA, N., LACOME, N., XU, L.-H., LYULIN, O., MANDIN, J.-Y., MAKI, a., MIKHAILENKO, S., MILLER, C., MISHINA, T., MOAZZEN-AHMADI, N., MÜLLER, H. S., NIKITIN, A., ORPHAL, J., PEREVALOV, V., PERRIN, a., PETKIE, D., PREDOI-CROSS, a., RINSLAND, C., REMEDIOS, J., ROTGER, M., SMITH, M., SUNG, K., TASHKUN, S. a., TENNYSON, J., TOTH, R., a. C. VANDAELE et VANDER AUWERA, J. (2011). The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(15):2395–2445.
- [James, 1990] JAMES, F. (1990). A review of pseudorandom number generators. *Computer Physics Communications*, 60:329–344.
- [James, 1994] JAMES, F. (1994). RANLUX : A Fortran implementation of the high-quality pseudorandom number generator of Lüscher. *Computer Physics Communications*, 79:111–114.
- [Joseph *et al.*, 2005] JOSEPH, D., EL HAFI, M., FOURNIER, R. et CUENOT, B. (2005). Comparison of three spatial differencing schemes in discrete ordinates method

- using three-dimensional unstructured meshes. *International Journal of Thermal Sciences*, 44(9):851–864.
- [Joseph *et al.*, 2009] JOSEPH, D., PEREZ, P., EL HAFI, M. et CUENOT, B. (2009). Discrete Ordinates and Monte Carlo Methods for Radiative Transfer Simulation Applied to Computational Fluid Dynamics Combustion Modeling. *Journal of heat transfer*, 131(5):052701.
- [Kawrakow et Fippel, 2000] KAWRAKOW, I. et FIPPEL, M. (2000). Investigation of variance reduction techniques for Monte Carlo photon dose calculation using XVMC. *Physics in medicine and biology*, 45(8):2163.
- [Kawrakow *et al.*, 2008] KAWRAKOW, I., MITEV, K., GERGANOV, G., MADZHUNKOV, J. et KIROV, a. (2008). Efficient photon transport in positron emission tomography simulations using VMC ++. *Journal of Physics : Conference Series*, 102:012014.
- [Kerker, 1969] KERKER, M. (1969). *The scattering of light and other electromagnetic radiation, 1969*. Academic, New York.
- [Khisamutdinov et Sidorenko, 1995] KHISAMUTDINOV, A. I. et SIDORENKO, L. (1995). Monte Carlo fictitious collision algorithms for nonlinear Boltzmann equation. *Monte Carlo Methods and Applications*, 1(3):221–240.
- [Knikker *et al.*, 2002] KNIKKER, R., VEYNANTE, D. et MENEVEAU, C. (2002). A priori testing of a similarity model for large eddysimulations of turbulent premixed combustion. In *Proceedings of the Combustion Institute*, volume 29, pages 2105–2111.
- [Knikker *et al.*, 2000] KNIKKER, R., VEYNANTE, D., ROLON, J. et MENEVEAU, C. (2000). Planar laser-induced fluorescence in a turbulent premixed flame to analyze large eddy simulation models. In *Proceedings of the International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer Vol 13*.
- [Kondratyev, 1969] KONDRATYEV, K. (1969). *Radiation in the atmosphere*. Academic Press, New York-London.
- [Koura, 1986] KOURA, K. (1986). Null-collision technique in the direct-simulation Monte Carlo method. *Physics of Fluids*, 29(11):3509–3511.
- [Lachowicz, 2011] LACHOWICZ, M. (2011). Microscopic, mesoscopic and macroscopic descriptions of complex systems. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 26(1):54–60.
- [Lacis et Oinas, 1991] LACIS, A. et OINAS, V. (1991). A description of the correlated k distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple Scattering in Vertically Inhomogeneous Atmospheres. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres (1984–2012)*, 96(D5):9027–9063.
- [Langley, 1883] LANGLEY, S. (1883). The selective absorption of solar energy. *American Journal of Science*, XXV(147):169–196.
- [Lebonnois *et al.*, 2010] LEBONNOIS, S., HOURDIN, F., EYMET, V., CRESPIAN, A., FOURNIER, R. et FORGET, F. (2010). Superrotation of Venus’ atmosphere analyzed with a full general circulation model. *Journal of Geophysical Research*, 115(E6).
- [Leppänen, 2007a] LEPPÄNEN, J. (2007a). *Development of a New Monte Carlo reactor physics code*. VTT Technical Research Centre of Finland.

- [Leppänen, 2007b] LEPPÄNEN, J. (2007b). Randomly Dispersed Particle Fuel Model in the PSG Monte Carlo Neutron Transport Code. *Proc. MC+ SNA 2007, Monterey, California, April 15,, 19.*
- [Leppänen, 2010] LEPPÄNEN, J. (2010). Performance of Woodcock delta-tracking in lattice physics applications using the Serpent Monte Carlo reactor physics burnup calculation code. *Annals of Nuclear Energy*, 37(5):715–722.
- [Lewis *et al.*, 1999] LEWIS, S. R., COLLINS, M., READ, P. L., FORGET, F., HOURDIN, F., FOURNIER, R., HOURDIN, C., TALAGRAND, O. et HUOT, J.-P. (1999). A climate database for Mars. *Journal of Geophysical Research*, 104(E10):24177.
- [Lin et Bardsley, 1977] LIN, S. et BARDSLEY, J. (1977). Monte Carlo simulation of ion motion in drift tubes. *The Journal of Chemical Physics*, 66(2):435–445.
- [Lin et Bardsley, 1978] LIN, S. et BARDSLEY, J. (1978). The null-event method in computer simulation. *Computer Physics Communications*, 15(3-4):161–163.
- [Liu *et al.*, 2000] LIU, F., SMALLWOOD, G. J. et GÜLDER, O. L. (2000). Application of the statistical narrow-band correlated-k method to low-resolution spectral intensity and radiative heat transfer calculations - effects of the quadrature scheme. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43:3119–3135.
- [Liu *et al.*, 2001] LIU, F., SMALLWOOD, G. J. et GÜLDER, O. L. (2001). Application of the statistical narrow-band correlated-k method to non-grey gas radiation in CO₂-H₂O mixtures : approximate treatments of overlapping bands. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 68:401–417.
- [Longo, 2002] LONGO, S. (2002). Direct derivation of Skallerud’s Monte Carlo method for charged particle transport from the linear Boltzmann equation. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 313(3-4):389–396.
- [Longo et Diomedee, 2004] LONGO, S. et DIOMEDE, P. (2004). Monte Carlo modeling of gas phase ion transport under thermal gradients and external fields. *European Physical Journal Applied Physics*, 185:177–185.
- [Lüscher, 1994] LÜSCHER, M. (1994). A portable high-quality random number generator for lattice field theory simulations. *Computer physics communications*, 79:100–110.
- [MacMillan, 1967] MACMILLAN, D. (1967). Note on a paper by J. Spanier concerning Monte Carlo estimators. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 15(2):264–268.
- [Malkmus, 1967] MALKMUS, W. (1967). Random Lorentz Band Model with Exponential-Tailed S-1 Line-Intensity Distribution Function. *Journal of the Optical Society of America*, 57(3):323–329.
- [Martin et Brown, 2001] MARTIN, W. et BROWN, F. B. (2001). Comparison of monte carlo methods for nonlinear radiation transport. Rapport technique, Los Alamos National Lab.
- [McClatchey *et al.*, 1973] MCCLATCHEY, R., BENEDICT, W. et CLOUGH, S. A. (1973). AFCRL atmospheric absorption line parameters compilation. Rapport technique, Air Force Cambridge Research Laboratories.
- [Metropolis, 1987] METROPOLIS, N. (1987). The beginning of the Monte Carlo method. *Los Alamos Science*, (Special Issue):125–130.

- [Metropolis et Ulam, 1949] METROPOLIS, N. et ULAM, S. (1949). The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, 44(247):335–341.
- [Miss *et al.*, 2007] MISS, J., JACQUET, O. et FORESTIER, B. (2007). Feasibility of using a universal point wise energy grid or a very fine multi-group energy grid in MORET5 criticality calculations. *In Joint International Topical Meeting on Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications*.
- [Modest, 1992] MODEST, M. F. (1992). the Monte Carlo Method Applied To Gases With Spectral Line Structure. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 22(3):273–284.
- [Modest, 2003a] MODEST, M. F. (2003a). Backward Monte Carlo simulations in radiative heat transfer. *ASME. Journal of Heat Transfer*, 125:57–62.
- [Modest, 2003b] MODEST, M. F. (2003b). Narrow-band and full-spectrum k-distributions for radiative heat transfer—correlated-k vs. scaling approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 76(1):69–83.
- [Modest, 2013] MODEST, M. F. (2013). *Radiative heat transfer*. Academic press, 3rd édition.
- [Moskalenko, 1979] MOSKALENKO, N. I. (1979). Pressure Induced IR Radiation Absorption in Atmospheres. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, 15(9):632–637.
- [Nottin *et al.*, 2000] NOTTIN, C., KNIKKER, R., BOGER, M. et VEYNANTE, D. (2000). Large eddy simulations of an acoustically excited turbulent premixed flame. *In Proceedings of the Combustion Institute*, volume 28, pages 67–73.
- [Pederson, 1991] PEDERSON, S. (1991). Mew Estimation in Highly Skewed Samples. Rapport technique, Los Alamos National Laboratory.
- [Perlmutter et Howell, 1964] PERLMUTTER, M. et HOWELL, J. R. (1964). Radiant transfer through a gray gas between concentric cylinders using Monte Carlo. *ASME. Journal of Heat Transfer*, 86:169–179.
- [Perrin et Hartmann, 1989] PERRIN, M. Y. et HARTMANN, J.-M. (1989). Temperature-dependent measurements and modeling of absorption by CO₂-N₂ mixtures in the far line-wings of the 4.3 [μm] m CO₂ band. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 42(4):311–317.
- [Pharr et Humphreys, 2010] PHARR, M. et HUMPHREYS, G. (2010). *Physically based rendering : From theory to implementation*. Morgan Kaufmann.
- [Piaud, 2007] PIAUD, B. (2007). *Modélisation mésoscopique des écoulements avec changement de phase à partir de l'équation de Boltzmann-Enskog . Introduction des effets thermiques*. Thèse de doctorat, Université Toulouse III - Paul Sabatier.
- [Piaud, 2010] PIAUD, B. (2010). Calculs sondes dans l'environnement EDStar-Mcm3D. Rapport technique, LAPLACE, Université de Toulouse.
- [Poitou, 2009] POITOU, D. (2009). *Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse - Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [Poitou *et al.*, 2012] POITOU, D., AMAYA, J., EL HAFI, M. et CUENOT, B. (2012). Analysis of the interaction between turbulent combustion and thermal radiation

- using unsteady coupled LES/DOM simulations. *Combustion and Flame*, 159(4): 1605–1618.
- [Poitou *et al.*, 2011] POITOU, D., EL HAFI, M. et CUENOT, B. (2011). Analysis of radiation modeling for turbulent combustion : development of a methodology to couple turbulent combustion and radiative heat transfer in LES. *Journal of Heat Transfer*, 133(6):062701.
- [Rayleigh, 1920] RAYLEIGH, J. (1920). *Scientific papers 1899-1920*. Cambridge University Press.
- [Rehfeld et Stute, 2008] REHFELD, N. S. et STUTE, S. (2008). Optimization of photon tracking in GATE. *In Nuclear Science Symposium Conference Record, 2008. NSS '08. IEEE*, pages 4013–4015.
- [Rehfeld *et al.*, 2009] REHFELD, N. S., STUTE, S., APOSTOLAKIS, J., SORET, M. et BUVAT, I. (2009). Introducing improved voxel navigation and fictitious interaction tracking in GATE for enhanced efficiency. *Physics in medicine and biology*, 54(7):2163–78.
- [Ren et Modest, 2013] REN, T. et MODEST, M. F. (2013). A Hybrid Wavenumber Selection Scheme for Line-By-Line Photon Monte Carlo Simulations in High-Temperature Gases. *Journal of Heat Transfer*, 135(8):084501.
- [Rivière *et al.*, 1992] RIVIÈRE, P., SOUFIANI, A. et TAINE, J. (1992). Correlated-k and fictitious gas methods for H₂O near 2.7 μ m. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 48(2):187–203.
- [Rjasanow et Wagner, 1998] RJASANOW, S. et WAGNER, W. (1998). A generalized collision mechanism for stochastic particle schemes approximating Boltzmann-type equations. *Computers and Mathematics with Applications*, 35(1-2):165–178.
- [Robert, 1958] ROBERT, G. (1958). Calculation of temperature distribution in glass plates undergoing heat treatment. *Journal of the American Ceramic Society*, 41(6):200–209.
- [Roger *et al.*, 2005] ROGER, M., BLANCO, S., EL HAFI, M. et FOURNIER, R. (2005). Monte Carlo Estimates of Domain-Deformation Sensitivities. *Physical Review Letters*, 95(18):180601.
- [Rothman *et al.*, 2013] ROTHMAN, L. S., GORDON, I. E., BABIKOV, Y., BARBE, a., CHRIS BENNER, D., BERNATH, P., BIRK, M., BIZZOCCHI, L., BOUDON, V., BROWN, L. R., CAMPARGUE, A., CHANCE, K., COHEN, E., COUDERT, L., DEVI, V., DROUIN, B., FAYT, a., FLAUD, J.-M., GAMACHE, R. R., HARRISON, J. J., HARTMANN, J.-M., HILL, C., HODGES, J., JACQUEMART, D., JOLLY, a., LAMOUROUX, J., LE ROY, R., LI, G., LONG, D., LYULIN, O., MACKIE, C., MASSIE, S., MIKHAILENKO, S., MÜLLER, H. S., NAUMENKO, O., a.V. NIKITIN, ORPHAL, J., PEREVALOV, V., PERRIN, a., POLOVTSEVA, E., RICHARD, C., SMITH, M., STARIKOVA, E., SUNG, K., TASHKUN, S. a., TENNYSON, J., TOON, G., TYUTEREV, V. G. et WAGNER, G. (2013). The HITRAN2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130:4–50.
- [Rothman *et al.*, 2009] ROTHMAN, L. S., GORDON, I. E., BARBE, A., BENNER, D. C., BERNATH, P., BIRK, M., BOUDON, V., BROWN, L. R., CAMPARGUE, A., CHAMPION, J.-P., CHANCE, K., COUDERT, L., DANA, V., DEVI, V., FALLY, S.,

- FLAUD, J.-M., GAMACHE, R. R., GOLDMAN, A., JACQUEMART, D., KLEINER, I., LACOME, N., LAFFERTY, W., MANDIN, J.-Y., MASSIE, S., MIKHAILENKO, S., MILLER, C., MOAZZEN-AHMADI, N., NAUMENKO, O., NIKITIN, A., ORPHAL, J., PEREVALOV, V., PERRIN, A., PREDOI-CROSS, A., RINSLAND, C., ROTGER, M., ŠIMEČKOVÁ, M., SMITH, M., SUNG, K., TASHKUN, S. a., TENNYSON, J., TOTH, R., VANDAELE, A. et VANDER AUWERA, J. (2009). The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(9-10):533–572.
- [Rothman *et al.*, 2010] ROTHMAN, L. S., GORDON, I. E., BARBER, R., DOTHE, H., GAMACHE, R. R., GOLDMAN, A., PEREVALOV, V., TASHKUN, S. a. et TENNYSON, J. (2010). HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(15):2139–2150.
- [Sarkar et Prasad, 1979] SARKAR, P. et PRASAD, M. (1979). Prediction of statistical error and optimization of biased Monte Carlo transport calculations. *Nuclear science and engineering*, 70(3):243–261.
- [Semiletova, 2005] SEMILETOVA, E. (2005). Information-calculating system spectroscopy of atmospheric gases. The structure and main functions. *Atmospheric and Oceanic Optics*, 18(09):685–695.
- [Shamsundar *et al.*, 1973] SHAMSUNDAR, N., SPARROW, E. et HEINISCH, R. (1973). Monte Carlo Radiation Solutions-effect of energy partitioning and number of rays. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16:690–694.
- [Sheng, 2006] SHENG, P. (2006). *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena*. Springer, 2 édition.
- [Siegel *et al.*, 2011] SIEGEL, R., HOWELL, J. R. et MENGÜÇ, M. (2011). *Thermal Radiation Heat Transfer*. CRC Press, 5th édition.
- [Skullerud, 1968] SKULLERUD, H. (1968). The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 1(2):1567–1568.
- [Soufiani *et al.*, 1985] SOUFIANI, A., HARTMANN, J.-M. et TAINE, J. (1985). Validity of band-model calculations for CO₂ and H₂O applied to radiative properties and conductive-radiative transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 33(3):243–257.
- [Soufiani et Taine, 1997] SOUFIANI, A. et TAINE, J. (1997). High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-k model for H₂O and CO₂. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(4):987–991.
- [Spanier, 1970] SPANIER, J. (1970). An analytic approach to variance reduction. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 18(1):172–190.
- [Starwest, 2014a] STARWEST (2014a). EDStaR (StaRWest Development Environment), [http ://edstar.lmd.jussieu.fr/](http://edstar.lmd.jussieu.fr/).
- [Starwest, 2014b] STARWEST (2014b). Monte Carlo - Transfert radiatif. *Ecole Thématique CNRS "Rayonnement thermique en milieux semi-transparents"*.
- [Szirmay-Kalos et Tóth, 2010] SZIRMAY-KALOS, L. et TÓTH, B. (2010). Efficient free path sampling in inhomogeneous media. *In Poster Proc. Eurographics 2010*.

- [Szirmay-Kalos *et al.*, 2011] SZIRMAY-KALOS, L., TÓTH, B. et MAGDICS, M. (2011). Free Path Sampling in High Resolution Inhomogeneous Participating Media. *Computer Graphics Forum*, 30(1):85–97.
- [Taine et Soufiani, 1999] TAINE, J. et SOUFIANI, A. (1999). Gas IR radiative properties : from spectroscopic data to approximate models. *Advances in heat transfer*, 33:295–414.
- [Tashkun et Perevalov, 2011] TASHKUN, S. a. et PEREVALOV, V. (2011). CDSD-4000 : High-resolution, high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(9):1403–1410.
- [Tashkun *et al.*, 2003] TASHKUN, S. a., PEREVALOV, V., TEFFO, J., a.D. BYKOV et LAVRENTIEVA, N. (2003). CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 82(1-4):165–196.
- [Terrée, 2011] TERRÉE, G. (2011). *La prise en compte des milieux participants dans EDStar – environnement de développement pour le calcul numérique du transfert radiatif, par les méthodes de Monte-Carlo – nécessitera une reprogrammation complexe*. Rapport de stage de master 2, RAPSODEE - Mines Albi - Université de Toulouse.
- [Tien, 1969] TIEN, C. (1969). Thermal Radiation Properties of Gases. *Advances in Heat Transfer*, 5:253–324.
- [Tonkov *et al.*, 1996] TONKOV, M. V., FILIPPOV, N. N., BERTSEV, V. V., BOUANICH, J. P., VAN-THANH, N., BRODBECK, C., HARTMANN, J.-M., BOULET, C., THIBAULT, F. et LE DOUCEN, R. (1996). Measurements and empirical modeling of pure CO₂ absorption in the 2.3 micrometre region at room temperature : far wings, allowed and collision-induced bands. *Applied optics*, 35(24):4863–4870.
- [Tóth et Magdics, 2010] TÓTH, B. et MAGDICS, M. (2010). Monte Carlo radiative transport on the gpu. *In NJSZT Grafgeo Conference*.
- [Turner et Larsen, 1997a] TURNER, S. et LARSEN, E. (1997a). Automatic variance reduction for three-dimensional Monte Carlo simulations by the local importance function transform-I : Analysis. *Nuclear science and engineering*, 127(1):22–35.
- [Turner et Larsen, 1997b] TURNER, S. et LARSEN, E. (1997b). Automatic variance reduction for three-dimensional Monte Carlo simulations by the local importance function transform-II : Numerical results. *Nuclear science and engineering*, 127(1):36–53.
- [Vegas-Sánchez-Ferrero *et al.*, 2012] VEGAS-SÁNCHEZ-FERRERO, G., AJA-FERNÁNDEZ, S., MARTÍN-FERNÁNDEZ, M. et PALENCIA, C. (2012). A direct calculation of moments of the sample variance. *Mathematics and Computers in Simulation*, 82(5):790–804.
- [Viskanta et Mengüç, 1987] VISKANTA, R. et MENGÜÇ, M. (1987). Radiation heat transfer in combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 13(2):97–160.
- [Walters et Buckius, 1992] WALTERS, D. et BUCKIUS, R. (1992). Rigorous development for radiation heat transfer in nonhomogeneous absorbing, emitting and

- scattering media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(12):3323–3333.
- [Walters et Buckius, 1994] WALTERS, D. et BUCKIUS, R. (1994). Monte Carlo methods for radiative heat transfer in scattering media. *Annual review of heat transfer*, 5:131–176.
- [Wang et Modest, 2007a] WANG, A. et MODEST, M. F. (2007a). An adaptive emission model for Monte Carlo simulations in highly inhomogeneous media represented by stochastic particle fields. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 104(2):288–296.
- [Wang et Modest, 2007b] WANG, A. et MODEST, M. F. (2007b). Spectral Monte Carlo models for nongray radiation analyses in inhomogeneous participating media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(19-20):3877–3889.
- [Wang et al., 1997] WANG, L. V., NORDQUIST, R. E. et CHEN, W. R. (1997). Optimal beam size for light delivery to absorption-enhanced tumors buried in biological tissues and effect of multiple-beam delivery : a Monte Carlo study. *Applied optics*, 36(31):8286–91.
- [Wollaston, 1802] WOLLASTON, W. H. (1802). A Method of Examining Refractive and Dispersive Powers, by Prismatic Reflection. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 92:365–380.
- [Woodcock et al., 1965] WOODCOCK, E., MURPHY, T., HEMMINGS, P. et LONGWORTH, S. (1965). Techniques used in the GEM code for Monte Carlo neutronics calculations in reactors and other systems of complex geometry. *In Proceedings of the Conference on Applications of Computing Methods to Reactor Problems*.
- [X-5 Monte Carlo Team, 2008] X-5 MONTE CARLO TEAM (2008). MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume 1 : Overview and Theory. Rapport technique, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.
- [Zhang, 2011] ZHANG, J. (2011). *Radiation Monte Carlo Approach dedicated to the coupling with LES reactive simulation*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Zhang et al., 2009] ZHANG, J., GICQUEL, O., VEYNANTE, D. et TAINE, J. (2009). Monte Carlo method of radiative transfer applied to a turbulent flame modeling with LES. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7):539–549.

Table des figures

2.1	Spectre électromagnétique	11
2.2	Angle solide élémentaire	14
2.3	Distribution de photons	15
2.4	Luminance monochromatique	16
2.5	Propagation des photons sans interaction avec le milieu	20
2.6	Interactions entre rayonnement et milieu participant	21
2.7	Luminance d'équilibre	23
2.8	Fonction de phase en milieu isotrope	25
2.9	fonctions de phase	26
2.10	Mécanismes d'interaction matière-rayonnement	34
2.11	Spectre d'absorption d'une raie isolée	35
2.12	Différence entre les profils de Lorentz et de Voigt	37
2.13	Effet de la fraction molaire sur la section efficace et le coefficient d'absorption d'une raie isolée	38
2.14	Effet de la pression sur la section efficace et le coefficient d'absorption d'une raie isolée	39
2.15	Effet de la température sur la section efficace et le coefficient d'ab- sorption d'une raie isolée	39
2.16	Le spectre d'absorption est égal à la somme des participations de toutes les transitions	40
2.17	Augmentation du nombre de raies significatives avec la température .	43
2.18	Exemple de spectres d'absorption haute-résolution	45
3.1	Exemples de probabilités discrètes, de densités de probabilité et de fonctions de répartition	51
3.2	Procédure d'échantillonnage	62
3.3	Milieu infini, monodimensionnel et purement absorbant	68
3.4	Milieu fini, monodimensionnel et purement absorbant	71
3.5	Luminance en milieu diffusant	75
3.6	Algorithme estimant $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu infini absorbant, diffu- sant et émettant	78
3.7	Algorithme avec traitement déterministe pur des albédos	80
3.8	Algorithme avec traitement déterministe puis stochastique des albédos	81

3.9	Algorithme estimant $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ et la sensibilité de $L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ à un paramètre ϖ de la fonction de phase	83
3.10	Milieu absorbant, émettant et diffusant, clos par des parois partiellement réfléchissantes	84
3.11	Algorithme estimant $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dans un milieu absorbant, émettant et diffusant et clos par des parois partiellement réfléchissantes	86
3.12	Algorithme estimant le bilan radiatif d'un petit volume homogène et isotherme $\delta\mathcal{V}$	88
4.1	Discrétisation des propriétés du milieu	95
4.2	Erreurs causées par la discrétisation des propriétés du milieu en fonction du nombre de mailles	95
4.3	Ajout de collisions nulles	99
4.4	Géométrie considérée pour le calcul du bilan radiatif	106
4.5	Champs de coefficient d'absorption, de diffusion et de luminance d'équilibre	107
4.6	Bilan radiatif en \mathbf{x}_0 sans ajout de collisions nulles	110
4.7	Algorithme à collisions nulles usuel permettant d'estimer $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$. .	111
4.8	Extension de l'algorithme de la Fig. 4.7 aux coefficients négatifs de collision nulle	115
4.9	Écart-type adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$	116
4.10	Temps de calcul adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$.	117
4.11	Temps de calcul pour une erreur relative de 1% adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$	118
4.12	Description de l'algorithme à collisions nulles retenu avec échantillonnage des transitions	123
4.13	Temps de calcul nécessaires à l'obtention d'une erreur relative de 1% en fonction du seuil ζ	126
4.14	Temps de calcul nécessaires à l'obtention d'une erreur relative de 1% en fonction de ρ	128
4.15	Géométrie de chambre de combustion retenue	131
4.16	Champs de propriétés produits par AVBP	132
4.17	Bilans radiatifs calculés par PRISSMA et l'algorithme à collisions nulles en différents points de la chambre de combustion	133
5.1	Spectres d'absorption calculés avec une approche raie-par-raie et par un algorithme de Monte-Carlo	142
5.2	Décomposition du \hat{k}_η en $h_{a,m,i,\eta}$ et $h_{n,m,i,\eta}$	146
5.3	Algorithme à collisions nulles avec échantillonnage des transitions . .	150
5.4	Algorithme à collisions nulles amélioré avec échantillonnage des transitions	155
5.5	Benchmark proposé dans l'article [André et Vaillon, 2010]	158
5.6	Spectres d'absorptions produits pour 3 points du cas C3 et $\tilde{k}_\eta(\mathbf{x})$ constants	162
5.7	Procédure d'échantillonnage des transitions moléculaires	167
5.8	Luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennes de bandes étroites pour le cas C2 en fonction de la base de données spectroscopique utilisée	170

5.9	Luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennes de bandes étroites pour le cas C2 en fonction de différents seuils minimums d'intensité	171
5.10	Luminances $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ moyennes de bandes étroites pour le cas C2 en fonction de différentes distances de troncature de raie	171
5.11	Principaux cas dans lesquels la condition $h_{n,m,i,\eta}(\mathbf{x}) > 0$ n'est pas respectée	174
6.1	Les algorithmes à collisions nulles permettent de supprimer toute approximation liée à la description des propriétés du milieu	179
D.1	The reciprocal algorithm. \tilde{f}_N is a Monte Carlo estimate of $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ justified by Eq. D.4.	205
D.2	The standard null-collision algorithm. \tilde{f}_N is a Monte Carlo estimate of $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$	206
D.3	The generalized null-collision algorithm in which there is no more constraint on the \hat{k} field.	208
D.4	Radiative transfer in an absorbing, scattering, emitting and reflecting enclosure.	211
D.5	Considered system : a cube of side $2L$, whose center is the Cartesian coordinate system origin.	212
D.6	Standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at (a) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ and (b) $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$	213
D.7	Computation time as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at (a) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ and (b) $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$	215
D.8	Computation time in order to reach a 1% standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at (a) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ and (b) $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$	216
E.1	Description of the proposed algorithm. It follows a energy-partitioning strategy until the extinction term ξ is less than a fixed criterion ζ in which case it switches to the algorithm introduced in [Galtier <i>et al.</i> , 2013].	231
E.2	Considered system : a cube of side $2L$, whose center is the Cartesian coordinate system origin (figure taken from [Galtier <i>et al.</i> , 2013]).	237
E.3	Time to reach a 1% standard deviation as a function of ζ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$, for $\varepsilon = 0$ and $\hat{k} = k_{a,max} + k_{s,max}$	239
E.4	Time to reach a 1% standard deviation as a function of ζ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$, for $\varepsilon = 1$ and $\hat{k} = k_{a,max} + k_{s,max}$	240
E.5	Time to reach a 1% standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$ for $\varepsilon = 1$ and $\zeta = 1$	240
E.6	Time to reach a 1% standard deviation as a function of ρ , $k_{a,max}L$, $k_{s,max}L$ at $\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0]$ for $\varepsilon = 1$ and $\zeta = 0.1$	241
E.7	Representation of the dihedral combustion chamber.	241
E.8	Temperature and concentrations fields.	242
E.9	Visualization of the radiative budget (W/m^3) within the dihedral combustion chamber.	244

E.10 Radiative budget (kW/m^3) along the X-axis (at position $y=0, z=0$) and along the Y-axis of the combustion chamber (at position $x=0.08\text{m},$ $z=0$).	244
--	-----

Liste des tableaux

2.1	Descripteurs microscopique, mésoscopique et macroscopique	18
2.2	Principales bases de données spectroscopiques	41
3.1	Intervalles de confiance de la loi normale	60
4.1	Validation de l'algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.7 pour l'esti- mation d'un bilan radiatif en $[0, 0, 0]$	113
4.2	Validation de l'algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.7 pour l'esti- mation d'un bilan radiatif en $[-D, 0, 0]$	113
4.3	Résultats et temps de calcul obtenus lors de l'estimation de $S_{r,\eta}$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ par l' algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.12	124
4.4	Résultats et temps de calcul obtenus lors de l'estimation de $S_{r,\eta}$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l' algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.12 . .	125
5.1	Luminances intégrées de 10cm^{-1} à 15000cm^{-1} pour six cas d'étude et pour différentes bases de données spectroscopiques	172
D.1	Estimation, standard deviation and computation time for the compu- tation of $A(\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0])$ and $A(\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0])$	214
E.1	Estimation, standard deviations and computation times for the com- putation of $A(\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0])$ according to ζ	238
E.2	Estimation, standard deviations and computation times for the com- putation of $A(\mathbf{x}_0 = [-L, 0, 0])$ according to ζ	239

Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives

Résumé : L'étude du transfert radiatif dans les gaz (atmosphères planétaires, chambres de combustion, *etc.*) se heurte à deux principales difficultés : les hétérogénéités et la dépendance spectrale des propriétés radiatives du milieu d'intérêt. Les travaux présentés dans ce manuscrit proposent, au travers d'une approche statistique du rayonnement, une solution à ces deux limites qui ne nécessite aucune approximation de modèle physique ou numérique. Cette approche conduira au développement d'algorithmes de Monte-Carlo considérés à l'heure actuelle comme méthodes de référence dans la communauté du transfert radiatif. La difficulté liée aux hétérogénéités du milieu participant sera traitée par une technique empruntée à d'autres disciplines de la physique du transport : les algorithmes à collisions nulles. Leur application au rayonnement consiste à ajouter arbitrairement aux événements d'absorption et de diffusion, un troisième type de collision n'ayant aucun effet sur le transport de photons : les collisions nulles. Ainsi, le coefficient d'extinction résultant de ces trois types de collision pourra être assumé comme homogène. Ensuite, il sera montré comment cette même technique lève un second verrou permettant de repenser de façon statistique l'idée de coefficient d'absorption. Cela ouvrira la voie à des algorithmes de Monte-Carlo qui estiment directement une observable radiative à partir de paramètres de transitions répertoriés dans des bases de données spectroscopiques sans avoir à précalculer rigoureusement le coefficient d'absorption.

Mots-clés : Transfert radiatif, Gaz, Méthode de Monte-Carlo, Hétérogénéité, Collision nulle, Raie d'absorption, Approche statistique, Transition moléculaire.

A statistical approach of radiative transfer in heterogeneous and gaseous media: from molecular transitions sampling to the computation of radiative observables

Abstract: Two major challenges are encountered when studying radiative transfer in gases (*e.g.* combustion chambers or planetary atmospheres): heterogeneity and spectral dependence of radiative properties. The work introduced in this manuscript, addresses this problem through a statistical approach of radiation that requires no model or numerical approximation. This approach leads to the development of Monte-Carlo methods, currently considered as reference solutions in the community of radiative transfer. The difficulty related to heterogeneity is handled by a technique borrowed from other fields of transport physics: null-collision algorithms. Their application to radiation consists in adding to the events of absorption and scattering a third arbitrary type of collision that has no effect on the photon transport. Thus, the extinction coefficient resulting from these three types of collisions can be assumed to be homogeneous. Then, it is shown how this very same technique opens the door to rethinking statistically the concept of absorption coefficient. This leads to Monte-Carlo algorithms that directly estimate radiative observables from transition parameters indexed in molecular spectroscopic databases, without the need of rigorously precomputing absorption coefficients.

Keywords: Radiative transfer, Gas, Monte-Carlo method, Heterogeneity, Null-collision, Absorption line, Statistical approach, Molecular transition.