

Had I the heavens' embroidered cloths,  
Enwrought with golden and silver light,  
The blue and the dim and the dark cloths  
Of night and light and of the half-light  
I would spread the cloths under your feet :  
But I, being poor, have only my dreams ;  
I have spread my dreams under your feet ;  
Tread softly because you tread on my dreams.

W.B. Yeats, "He wishes for the cloths of heaven"



# Remerciements

Il est toujours difficile d'exprimer sa gratitude en une phrase, surtout pour des personnes qui ont été un soutien permanent pendant des années.

Je voudrais remercier Monsieur Didier Lecomte pour m'avoir accueilli au sein du centre Energétique Environnement de l'Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, et pour avoir accepté d'être mon directeur de thèse. Merci également à monsieur René Caubet pour m'avoir accepté au sein de l'équipe de synthèse d'images de l'Institut de Recherche en Informatique de Toulouse.

J'exprime mes plus vifs remerciements à Messieurs Paul Lybaert et Bernard Péroche pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail de thèse se situant à la frontière de leurs domaines de recherches respectifs. Merci également aux autres membres du jury : Monsieur Georges Charnay, qui a présidé lors de ma soutenance, Monsieur Pedro Coelho, qui a bien voulu me laisser répondre en français à ses questions en anglais et qui a toujours fait preuve d'une patience et d'une disponibilité remarquables lors de nos échanges divers, et Monsieur Bernard Ribes dont l'avis sur les applications industrielles de mon travail est précieux.

Un merci spécial à mes trois encadrants : Madame Mouna El Hafi, Monsieur Richard Fournier, et Monsieur Mathias Paulin. Leur enthousiasme, leur passion pour leur métier de chercheur et leurs compétences m'ont fait passer trois années (et un peu plus) extraordinaires. Merci Mouna pour ta patience, tes conseils, et la façon que tu as eu de me guider tout au long de cette thèse en gardant les idées claires sur ce qui était important. Merci Richard pour ton fourmillement d'idées, tes compétences scientifiques, ta bonne humeur, et la façon que tu as parfois de répondre à un problème que je t'expose en trouvant la solution à un autre que je ne m'étais pas encore posé. Longue vie au congrès annuel de rayonnement de Roffiac. Merci enfin à toi Mathias. Tu n'as pas eu le rôle le plus facile, mais tu as toujours su répondre présent en gardant le sourire quand je débarquais à l'Irit en demandant un modèle de four pour la veille. J'espère que tu te remettras un jour de ma façon de coder.

Je voudrais également profiter de cette occasion pour remercier tous ceux que j'ai pu cotoyer à l'EMAC et à l'IRIT et qui ont contribué chaque jour à faire de ma période de thèse un moment inoubliable. Merci donc dans le désordre à Pierre, Elian, Philippe, Souhila, Petra, Matthieu, James, Bruno, Brian, Tahar, Didier & Didier, Jean-Pierre, Patrice, Véro, Michel, Bruno & Bruno, Yannick, Radu, Jean-Louis, Ze, OLR, Fabien, Cédric, Pickeu, Denis, Jean-Jacques, Bernard, Jean-Claude, Jean-Marie, Ludivine, Pupu, Sandrine, Valérie, Elisabeth,

stb, Sylvain, Ange, Carlos, Hubert et Sofia, Tuyet, Yilmaz (vive le Galatasaray), Mohamed, Marie-Elise, Nicolas, Jaroslav, Gilles, Serge, Mariem, Lamassol, Céline, Staedelmann, Thomas, Maria-Aurora, Patricia, Lionel, Christophe, Tegan, Luc (super ce RayOfLight!), Guillaume, jlj, Monique, Yves, Corteu, Paul, Francis, Cathy et Annie. J'espère que ceux que j'oublie ici ne m'en voudront pas.

Des remerciements particuliers à mes collègues de bureau des premières heures : Véro et Jean-Henry pour leur gentillesse. Je n'ai pas été plus malheureux par la suite avec Blandine et Sandrine, Fabien, Benu, Fabrice, et même ce Jean-Michel que je connais à peine et qui ressemble à un de mes ex-colocataires.

Merci beaucoup à mes collègues thésards rayonneux pour tous les échanges que nous avons pu avoir : Amaury le patriarche, DJ David Joseph qui commence à inquiéter la communauté internationale, Vincent pour sa déprime chronique qui m'a toujours remonté le moral, et Cyril et Maxime les petits nouveaux qui promettent.

Si les semaines sont importantes, les week-end sont primordiaux ; ils n'auraient pas été aussi agréables, mais peut-être plus reposants sans Mohamed, parfois Sébastien, et le Garden Club Revélois.

Les mots ne sont pas suffisants pour exprimer toute ma reconnaissance envers Laetitia, ma compagne, qui a toujours été là dans les moments les plus agréables comme les plus difficiles. Elle a été mon soutien et mon bonheur depuis que je la connais.

Je souhaite terminer par des remerciements à mes parents qui m'ont permis de faire les études que je désirais et à qui je ne dis pas assez souvent que je les aime.

# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>5</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>9</b>
<b>Résumé - Abstract</b>	<b>11</b>
<b>Chapitre 1 — Description du problème</b>	<b>15</b>
1.1 Introduction . . . . .	15
1.2 Rejets de la combustion . . . . .	16
1.3 Place du rayonnement dans les systèmes de combustion . . . . .	18
1.3.1 Influence de la dimension du système sur les flux rayonnés dans le cas d'une géométrie monodimensionnelle à plans parallèles infinis . . . . .	18
1.3.2 Influence des flux radiatifs sur la production des $NO_x$ dans le cas d'une flamme monodimensionnelle à jets opposés. . . . .	19
1.4 Sources de rayonnement et interaction matière rayonnement dans les systèmes de combustion . . . . .	22
1.5 Des modèles de transfert radiatif aux questions de simulation numérique . .	24
1.6 Relation entre transfert radiatif en génie des procédés et synthèse d'images .	26
<b>Chapitre 2 — Modélisation physique des transferts radiatifs</b>	<b>29</b>
2.1 Physique du rayonnement . . . . .	29
2.1.1 Processus d'émission et d'absorption . . . . .	30
2.1.2 Grandeurs caractéristiques . . . . .	36
2.1.2.1 Coefficient d'absorption . . . . .	36
2.1.2.2 Luminance et grandeurs intégrées . . . . .	37
2.2 Equation de transfert radiatif . . . . .	41
2.3 Modèles spectraux représentant le rayonnement des gaz . . . . .	44
2.3.1 Modèle raie par raie . . . . .	44
2.3.2 Modèles simplifiés . . . . .	45
2.3.2.1 Modèles globaux . . . . .	45
2.3.2.2 Modèles de bandes étroites en transmittivité moyenne . . .	47
2.3.3 Modèle de bandes étroites en k-distribution . . . . .	50
2.3.4 Mise en œuvre des modèles de bandes dans les milieux hétérogènes .	51
2.4 Propriétés spectrales de la suie . . . . .	55
2.4.1 Corrélations spectrales . . . . .	56

2.5	Méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif . . . . .	57
2.5.1	Méthode des zones . . . . .	57
2.5.2	Méthode des ordonnées discrètes . . . . .	58
2.5.3	Méthode des harmoniques sphériques . . . . .	58
2.5.4	Ray Tracing . . . . .	58
2.5.5	Méthode de Monte Carlo . . . . .	59
<b>Chapitre 3 — Développements méthodologiques dans le contexte de la synthèse d'images</b>		<b>61</b>
3.1	De la représentation spectrale à la couleur . . . . .	61
3.2	Modèles locaux . . . . .	64
3.3	Modèles globaux . . . . .	66
3.3.1	Méthodes des radiosités . . . . .	67
3.3.2	Lancé de rayons . . . . .	68
3.3.3	Tracé de chemin inverse . . . . .	70
3.3.4	Tracé bidirectionnel . . . . .	70
3.3.5	Photon mapping . . . . .	70
3.4	Approche objet . . . . .	71
<b>Chapitre 4 — Développements de la méthode de Monte Carlo : vers une simulation 3D des transferts radiatifs infra-rouge en milieu gazeux</b>		<b>75</b>
4.1	Intégration par la méthode de Monte Carlo . . . . .	77
4.1.1	Principe de la méthode . . . . .	77
4.1.2	Exemple d'intégration par la méthode de Monte Carlo . . . . .	79
4.2	Ecriture de l'ETR en puissances nettes échangées (PNE) . . . . .	81
4.3	Modèle en bandes étroites et modèle de Malkmus . . . . .	86
4.4	Inclusion de la formulation en k-distribution . . . . .	88
4.5	Génération des rayons et choix des pdf adaptées aux variables . . . . .	89
4.5.1	Tirage des positions et direction "d'émission" . . . . .	91
4.5.1.1	Emission depuis une paroi . . . . .	91
4.5.1.2	Emission par le gaz . . . . .	93
4.5.2	Positions d'échange . . . . .	99
4.5.3	Bandes étroites . . . . .	99
4.5.4	Coefficients d'absorption . . . . .	100
4.5.5	Synthèse sur la procédure de génération des rayons . . . . .	102
4.6	Reconstruction des bilans à partir des échanges . . . . .	107
4.7	Application sur une géométrie axisymétrique . . . . .	108
4.7.1	Tests de validation . . . . .	110
4.7.1.1	Configuration de plans parallèles . . . . .	110
4.7.1.2	Configuration 2D cartésienne . . . . .	111
4.7.1.3	Configuration 2D cylindrique . . . . .	112

---

<b>Chapitre 5 — Construction et optimisation de l’outil 3D</b>	<b>115</b>
5.1 Définition des objets . . . . .	116
5.1.1 Définition de la scène . . . . .	116
5.1.2 Primitives géométriques . . . . .	116
5.1.3 Exemple : modélisation d’un four . . . . .	118
5.2 Trajectographie et calcul des intersections . . . . .	118
5.3 Structures de données . . . . .	120
5.3.1 Volumes englobants . . . . .	121
5.3.2 Grilles régulières . . . . .	122
5.3.3 Octrees et n-trees . . . . .	122
5.3.4 BSP Tree . . . . .	124
5.3.5 Géométrie discrète . . . . .	124
5.3.6 Classification 5D des rayons . . . . .	125
5.3.7 Choix de la structure accélératrice du suivi des rayons . . . . .	125
5.4 Suivi des rayons . . . . .	126
5.4.1 Parcours de la grille . . . . .	126
5.4.2 Evaluation des intersections . . . . .	127
5.4.3 Exemple d’intersection avec un cylindre . . . . .	127
5.5 Oracle de subdivision adapté à un milieu participant . . . . .	128
5.6 Exemples d’application . . . . .	129
5.6.1 Validation dans le cas d’un cylindre . . . . .	129
5.6.2 Four schématique . . . . .	129
5.6.3 Traitement d’un four issu d’une modélisation par AutoCad . . . . .	133
 <b>Chapitre 6 — Conclusion</b>	 <b>139</b>
 <b>Liste des figures</b>	 <b>141</b>
 <b>Bibliographie</b>	 <b>145</b>
  <b>Annexes</b>	  <b>155</b>
 <b>Annexe A — Sensibilités</b>	 <b>157</b>
 <b>Annexe B — Réflexions aux parois</b>	 <b>159</b>
 <b>Annexe C — Description d’un four de type industriel</b>	 <b>161</b>





# Nomenclature

## Abréviations

BRDF	: bidirectional reflectance distribution function : réflectance bidirectionnelle
CFD	: computational fluid dynamics
ETR	: équation de transfert radiatif
MCM	: Monte Carlo method : méthode de Monte Carlo
PNE	: puissance nette échangée
cdf	: cumulative d'une fonction de distribution
c-k	: correlated-k : méthode des k corrélés
pdf	: probability density function : fonction de densité de probabilité

## Symboles

$c$	: vitesse de la lumière ( $m.s^{-1}$ )
$f_v$	: fraction volumique de suie
$h$	: constante de Planck ( $6.6260755 \pm 0.0000040.10^{-34}$ J.s)
$\hbar$	: constante de planck réduite $\hbar = \frac{h}{2\pi}$
$k$	: coefficient d'absorption dépendant de la pression ( $m^{-1}.atm^{-1}$ )
$k_B$	: constante de Boltzmann ( $1.3806 \pm 0.000012.10^{-23} J.K^{-1}$ )
$l$	: longueur ( $m$ )
$\vec{n}$	: normale à une surface
$\vec{q}_r$	: vecteur flux radiatif ( $W/m^2$ )
$\vec{u}$	: direction
$t$	: temps (s)
$x_k$	: fraction molaire de la $k^{ième}$ espèce chimique
$A_{21}$	: coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée
$B_{12}$	: coefficient d'Einstein pour l'absorption
$A_{21}$	: coefficient d'Einstein pour l'émission induite
$E$	: énergie ( $W$ ) ou éclaircissement ( $W/m^2$ )
$H$	: fonction de Heaviside
$L(\vec{r}, \vec{u})$	: Luminance au point $\vec{r}$ dans la direction $\vec{u}$ ( $W/m^2/str/Hz$ )
$M$	: émittance ( $W/m^2$ )
$\mathcal{R}$	: opérateur de réflexion

$P$	: pression (atm)
$R$	: nombre $\in [0, 1]$ correspondant à la valeur d'une cumulative
$S$	: surface ( $m^2$ )
$S_r$	: terme source radiatif ( $W/m^3$ )
$V$	: Volume ( $m^3$ )

## Symboles grecs

$\beta$	: angle ( $rad$ )
$\varepsilon$	: émissivité
$\eta$	: nombre d'onde ( $m^{-1}$ )
$\gamma$	: demi-largeur à mi-hauteur d'une raie ( $m^{-1}$ )
$\kappa$	: coefficient d'absorption ( $m^{-1}$ )
$\lambda$	: longueur d'onde (m)
$\nu$	: fréquence (Hz)
$\omega$	: terme de pondération
$\phi$	: paramètre de forme, flux ( $W$ ), ou angle ( $rad$ )
$\rho$	: BRDF
$\sigma$	: constante de Stefan-Boltzmann ( $5.67.10^{-8}W.m^{-2}.K^{-4}$ ) ou écart-type
$\tau(l)$	: transmittivité d'une colonne de gaz de longueur $l$
$\theta$	: angle ( $rad$ )
$\Delta$	: intervalle
$\varphi_{A \leftrightarrow B}$	: flux net ou puissance d'énergie radiative entre A et B (W)
$\Phi$	: fonction de phase

## Indices

0	: initial
$\infty$	: infini
$b$	: corps noir
$\lambda$	: grandeur dépendante de la longueur d'onde
$\eta$	: grandeur dépendante du nombre d'onde
$\nu$	: grandeur dépendante de la fréquence

# Résumé - Abstract

## Résumé

La modélisation du transfert radiatif et la production, dans des temps de calcul raisonnables, de solutions de référence dans des procédés de combustion (en présence de mélanges de gaz et de particules à haute température) restent encore des problèmes ouverts, alors que l'ensemble apparaît nécessaire au bon dimensionnement de ces procédés. En effet, la production d'espèces mineures polluantes comme les  $No_x$  est particulièrement sensible au niveau de température, et la durée de vie des structures dépend du flux radiatif pariétal. Simuler le transfert de chaleur par rayonnement dans de tels systèmes demande de tenir compte simultanément des complexités spectrale (spectre de raies des gaz de combustion) et géométrique (détails géométriques des brûleurs et échangeurs) du problème. Les méthodes de Monte Carlo sont connues pour devenir compétitives face aux méthodes déterministes dès lors que le système atteint de tels niveaux de complexité. Elles permettent également la mise en œuvre de techniques d'analyse à partir de possibilités de découpage zonal (volumes et parois) et de calculs de sensibilités. Elles s'appuient enfin sur des algorithmes de suivi de rayons pour lesquels il est possible d'hériter des avancées significatives issues de la communauté de synthèse d'images. Ce sont là les principales raisons qui justifient ici le choix du développement d'une méthode de Monte Carlo dans laquelle une attention particulière est portée sur l'optimisation des lois de générations aléatoires (spectrales et géométriques), afin d'assurer de bonnes qualités de convergence dans les applications aux procédés à hautes températures. En nous plaçant à l'interface entre les recherches actuelles en synthèse d'images et les travaux récents de modélisation radiative en milieu gazeux, nous proposons une méthodologie permettant la production de solutions de référence pour la validation en configuration réelle des modèles approchés communément employés en phase de dimensionnement.

## Abstract

The increasing consumption of limited source of energy and the severity of air quality legislations necessitate the improvement of the thermal design and the emission performances of combustion processes objectives that require intensive analysis of radiative heat transfers. Despite numerous studies in modeling radiation in multidimensional configurations an accurate analysis of three-dimensional non-grey radiation in real combustion systems is still lacking. That is due to the prohibitive computing time required to simultaneously take into

account complex geometries and detailed physical properties (spectral dependence of surfaces and volumes, directional surface properties, anisotropic scattering). In deterministic models this difficulty is exacerbated, and the common techniques to solve the radiative transfer equation generally rely on various degrees of approximation. Numerous previous works show that statistical methods such as the Monte Carlo Method (MCM) are able to include easily the important effects into numerical models without approximation. One advantage of this method is to provide a better understanding of physical analysis, that is due to the domain decomposition in volumes and surfaces (zonal method) and the possibility of cost-less sensitivity calculations. Finally, the MCM are based on ray tracking algorithms, and we could really inherit the know-how from the computer graphics community by using their advanced tools. All these reasons justify the choice of the MCM. Additionally, this study investigates some suitable probability density functions (for the spectral and the geometric integrations) to improve the convergence of the MCM. By combining the advanced tools in the computer graphics community and our recent developments in modeling of gas radiative heat transfer, we propose here an approach that allows to produce benchmark solutions to validate the approximate models that are commonly used in the stage of designing processes.

# Préambule et organisation du mémoire

Ce sujet de thèse lié à la production de solutions radiatives de référence en géométrie complexe dans des procédés à haute température, est né de la rencontre entre deux équipes de recherche qui se sont aperçues qu'elles menaient des travaux et développaient des savoir-faire complémentaires. L'équipe Rayonnement et Procédés de l'École des Mines d'Albi-Carmaux, associée au Laboratoire d'Énergétique de Toulouse, a mené des travaux sur la résolution de l'équation de transfert radiatif (ETR) par la méthode de Monte Carlo en géométrie monodimensionnelle, en tenant compte de toute la complexité spectrale des propriétés radiatives des gaz de combustion. Par ailleurs, l'équipe Synthèse d'Images de l'Institut de Recherche en Informatique de Toulouse travaille à la résolution de cette même équation, avec des simplifications au niveau spectral, mais en s'attachant à une représentation fidèle de scènes tridimensionnelles complexes.

La finalité de ce travail de thèse est donc, d'une part d'unifier les savoir-faire des deux équipes pour permettre la résolution spectrale de l'ETR en géométrie complexe, mais aussi et c'est peut-être le plus important, d'établir une communication durable entre ces deux univers par la création d'une problématique et d'un langage communs. Dans cet esprit je m'attacherai à être aussi pédagogue que possible sur les différents aspects abordés durant nos travaux, au risque de paraître parfois simpliste.

Ce travail s'inscrit dans la continuité logique du travail de thèse d'Amaury de Guilhem de Lataillade portant sur la modélisation des transferts radiatifs dans les systèmes de combustion, d'une part parce qu'il en constitue une extension à des géométries réelles, et d'autre part parce qu'il perpétue la dynamique d'interdisciplinarité de cette activité de recherche. Cette précédente étude a fait la démonstration d'un couplage avec la cinétique chimique, chose qui ne sera pas abordée dans ce mémoire, mais qui reste un objectif essentiel du projet plus général auquel j'ai tenté de contribuer.

Le mémoire est organisé de la façon suivante :

- Le premier chapitre présente le positionnement de la thèse en termes de problématique industrielle et scientifique en ce qui concerne le transfert radiatif dans les systèmes de combustion. Ce chapitre présente également les parallèles possibles entre une telle logique, de type *génie des procédés*, et la dynamique de recherche actuelle dans le do-

maine de la *synthèse d'images*.

- Ensuite, nous définissons les principales grandeurs utilisées pour décrire la physique du transfert d'énergie par rayonnement (propriétés spectrales d'émission et interaction matière-rayonnement). Sur cette base, nous établissons l'équation de transfert radiatif en évoquant sommairement les méthodes de résolution les plus utilisées actuellement.
- Le troisième chapitre est plus particulièrement consacré aux développements faits en synthèse d'images. Il évoque la problématique de la production d'une image en couleur à partir de calculs sur le spectre et aborde quelques unes des logiques algorithmiques découlant de ces besoins spécifiques. Il finit par poser les principes des méthodes de conception orientées objet, comme une étape nécessaire à la production d'outils de simulation souples et efficaces. Certains des éléments de ce chapitre peuvent apparaître comme très éloignés de la préoccupation centrale de cette thèse, mais nous espérons qu'ils seront d'un soutien utile pour le lecteur physicien souhaitant comme nous bénéficier des idées développées dans cette communauté.
- A ce stade, nous affichons un choix de méthode de résolution : la méthode de Monte Carlo sur la base d'une formulation intégrale de l'équation de transfert radiatif. Nous justifions ce choix en nous référant aux développements théoriques récents dans ce domaine, principalement en ce qui concerne les questions de formulation, les possibilités d'optimisation des lois de générations aléatoires optico-géométriques et spectrales, et les techniques d'analyse associées (matrices de puissances nettes échangées et matrices de sensibilités). L'essentiel du chapitre est ensuite consacré à l'adaptation des lois de générations aléatoires en fonction de nos exigences de traitements géométriques tridimensionnels. Nous finissons par donner un exemple de mise en œuvre dans une configuration géométrique simple : il s'agit d'une géométrie cylindrique 2D, un cas de référence usuel pour le calcul du transfert radiatif en génie des procédés.
- Dans le dernier chapitre, nos travaux détaillés au chapitre précédent sur les optimisations optico-géométriques et spectrales sont associés à une méthodologie de synthèse d'images pour l'optimisation du suivi des rayons, dans un outil souple issu d'une conception orientée objet et pouvant traiter des géométries complexes. Nous illustrons finalement l'édifice ainsi obtenu par un exemple de calcul dans un four dédié à un procédé d'incinération de composés organiques volatils, présentant de fortes variations d'échelles entre les dimensions globales de la scène et les détails géométriques d'un brûleur de type veine d'air.

Le manuscrit se termine par un paragraphe de conclusion et quelques éléments de prospective.

# Chapitre 1

## Description du problème

Ce premier chapitre d'introduction expose brièvement le contexte industriel dans lequel viennent s'insérer les travaux rapportés dans ce manuscrit. Les enjeux scientifiques de la modélisation et de la simulation du transfert radiatif apparaissent dans le contexte plus vaste de la compréhension et du contrôle du transfert de chaleur dans les installations de combustion. Enfin, nous faisons le lien entre la problématique du transfert radiatif en génie des procédés et en synthèse d'images.

### 1.1 Introduction

Le transfert d'énergie par rayonnement est un problème complexe mais passionnant et intervient dans de nombreuses disciplines de la physique. Pour l'astrophysicien, c'est un précieux messenger qui vient le renseigner aussi bien sur les secrets des phénomènes lointains que sur l'histoire de l'univers, dont la jeunesse tumultueuse (le big-bang) est à l'origine du rayonnement fossile à 3K du fond du ciel. Pour le biologiste ou le physicien de la matière, les courtes longueurs d'onde sont un scalpel pour aller disséquer la matière. L'atmosphéricien étudie ce phénomène comme l'un des mécanismes de la machine climatique ; à ce titre il est amené à s'intéresser aux mêmes domaines spectraux que nous, à savoir ceux de l'infra-rouge. En effet, le rayonnement reçu du soleil est en partie piégé et absorbé par la terre qui émet du rayonnement infra-rouge (se comportant ainsi comme un générateur d'entropie) à son tour piégé en partie par l'atmosphère et la couverture nuageuse. Ce phénomène bien connu est en ce moment sous les feux de l'actualité en raison du réchauffement constaté de la planète et est au centre d'une mobilisation internationale pour réduire les émissions de gaz à effet de serre dues à l'activité humaine industrielle. Dans un même esprit de protection environnementale, nous nous intéressons ici aux mécanismes de production d'espèces polluantes dans les systèmes de combustion, en particulier à la façon avec laquelle le rayonnement thermique peut affecter ces émissions. Les cinétiques chimiques de production de polluants sont en effet très sensibles à la température, dont le niveau résulte de l'équilibre entre les différents mécanismes de production et de transfert d'énergie, parmi lesquels le rayonnement peut rapidement jouer un rôle prépondérant, notamment dans les systèmes combustifs de grande dimension. Pour les mêmes raisons, indépendamment des questions environnementales, une bonne compréhension des transferts radiatifs est également essentielle pour un bon dimen-

sionnement énergétique du système, que ce soit en terme de maîtrise des flux énergétiques pariétaux (dimensionnement des échangeurs par exemple), ou en terme de résistance des matériaux face aux contraintes thermiques.

## 1.2 Rejets de la combustion

La combustion tient une place importante dans l'activité humaine et est à la base de la révolution industrielle amorcée au *XIX*<sup>ième</sup> siècle. Mais le prix à payer pour la productivité et le développement économique est le rejet en quantités importantes de polluants, variable selon les conditions de combustion et la nature du combustible. Parmi les rejets reconnus comme nocifs, et qui font l'objet d'une préoccupation toujours plus grande de la part de la communauté scientifique et civile, on peut énumérer :

1. les poussières

Elles comprennent des particules solides non combustibles et des imbrûlés dûs à une combustion incomplète. Elles entraînent, pour les plus fines, des problèmes respiratoires chez l'homme et sont à l'origine de pathologies cancéreuses.

2. le dioxyde de soufre ( $SO_2$ )

Il est issu de la combustion de combustibles fossiles contenant du soufre, au premier rang desquels on trouve les charbons et les fiouls. Des concentrations importantes en dioxyde de soufre peuvent provoquer des troubles respiratoires, accentués chez l'asthmatique. Les pollutions historiques de 1952 et 1956 à Londres ont provoqué des troubles respiratoires et cardiaques avec une augmentation significative de la mortalité chez les personnes les plus sensibles. Par ailleurs, le dioxyde de soufre peut se transformer par oxydation en  $SO_3$  sous l'action du rayonnement ultra-violet solaire, puis en présence d'eau, donner de l'acide sulfurique ( $H_2SO_4$ ). Il contribue alors au phénomène des pluies acides.

3. les composés organiques volatils (COV)

Ils proviennent de diverses molécules qui n'ont pas été totalement décomposées par la combustion. Ce terme recouvre une grande diversité de polluants dont la toxicité varie suivant la nature. Leur effet sur l'homme va de la simple gêne olfactive à des effets mutagènes et cancérogènes, en passant par l'irritation et la diminution des capacités respiratoires. Ils sont en outre impliqués dans le processus de formation d'ozone dans la basse atmosphère.

4. les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP)

Les HAP sont une sous-famille des COV dont la formation est très sensible à la température [Khalfi, 2000]. Ils sont notoirement connus pour leur effet cancérogène.

5. le monoxyde de Carbone (CO)

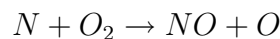
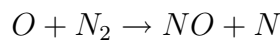
Il provient de la combustion incomplète des combustibles et carburants. Au cours de la combustion, le CO peut être formé soit directement à partir du carbone contenu dans le déchet, soit à partir de produits de combustion intermédiaires. La combustion incomplète peut être due à de mauvaises conditions de mélange, mais aussi à une température insuffisante. Le monoxyde de carbone est un poison violent qui a la propriété de se fixer sur l'hémoglobine du sang à la place de l'oxygène, entraînant la



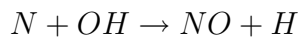
mort à des concentrations élevées (mort en quelques minutes pour des concentrations  $> 5500 \text{ mg/m}^3$  [Bicocchi, 1998]). Il est également néfaste à l'environnement en tant que précurseur à la formation d'ozone ou de PAN (Péroxyacétylnitrate).

6. les oxydes d'azote ( $NO_x$ )

En France, ils proviennent surtout des moyens de transport et des installations de combustion. Les efforts faits pour réduire les émissions dues aux véhicules sont largement compensés par l'élargissement constant du parc automobile et les concentrations dans l'air ne diminuent guère. Le terme de  $NO_x$  recouvre tous les composés azotés gazeux :  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O_3$ ,  $N_2O$ , et  $HNO_3$ , les deux plus dangereux pour les voies respiratoires étant le  $NO$  et le  $NO_2$  [Borghi and Destriau, 1995]. On a identifié trois mécanismes de formation des  $NO_x$  : la formation thermique, la formation du  $NO$  *combustible*, et la formation du  $NO$  *précoce*. La formation des  $NO_x$  thermiques obéit au mécanisme de Zeldovitch :



La première réaction a une énergie d'activation élevée et n'intervient donc qu'à haute température avec un seuil autour de 1700K ou 1800K [Borghi and Destriau, 1995, Stansel et al., 1995, Costa et al., 1996, Warnatz et al., 1996], ce qui explique la dénomination de *thermique*. Une autre réaction dans laquelle le  $NO$  est formé à partir de deux radicaux est possible :



Cette formation de  $NO$  dite *combustible* se fait à partir d'azote lié chimiquement au combustible et pourra avoir une importance non négligeable lors de la combustion de fiouls lourds ou de charbons. Enfin, les  $NO$  *précoces* sont formés à partir de radicaux  $CH$  présents au début de la combustion.

En plus de leur effet sur les voies respiratoires, les  $NO_x$  sont incriminés dans la détérioration de la couche d'ozone, et demandent à être pris en compte lors de l'étude de l'effet de serre, ou de la formation de pluies acides.

Cette liste n'est pas exhaustive (on pourrait notamment ajouter les dioxines et les métaux lourds à la liste) mais montre bien la variété des polluants émis par les installations de combustion et les effets néfastes de ces rejets. Les coûts générés par cette pollution sont multiples : coûts de réduction des polluants en sortie d'installation, coûts de réparations de dégâts (nettoyage des façades, réparation des bâtiments et remplacement de la flore attaquée par les pluies acides), coûts de santé (asthme, insuffisance respiratoire, cancers) [Rabl et al., 1998], sans compter les coûts dus à l'accroissement de l'effet de serre. Les réglementations sur les rejets des systèmes industriels sont de plus en plus sévères et par conséquent, la demande est de plus en plus forte pour des systèmes de combustion propres.

Dans cette optique, le dimensionnement des installations nécessite une compréhension fine des phénomènes physiques couplés de la combustion, ainsi que des outils de simulation précis et numériquement performants. D'autre part, de tels outils doivent être suffisamment flexibles

pour accompagner l'ingénieur dans la succession des études nécessaires à un dimensionnement optimal de systèmes.

## 1.3 Place du rayonnement dans les systèmes de combustion

Il y a aujourd'hui deux questions pour lesquelles le rayonnement peut s'avérer essentiel dans la prise en compte des bilans d'énergie dans les systèmes de combustion. D'une part, il intervient dans le dimensionnement énergétique des procédés à haute température et d'autre part, les nouvelles lois environnementales imposent des seuils de plus en plus sévères d'émission de polluants.

Pour illustrer ces deux aspects, nous allons considérer deux exemples dans lesquels nous allons évaluer l'importance du rayonnement. Un premier exemple où l'on simule grossièrement les phénomènes énergétiques mis en jeu aux parois d'une chambre de combustion permet de montrer l'influence des effets d'échelle du système sur l'importance des flux radiatifs par rapport aux autres modes de transfert. La deuxième application considère une flamme monodimensionnelle à jets opposés de très faible dimension (quelques centimètres) pour laquelle on observe que le flux rayonné est faible par rapport aux autres modes de transfert de chaleur mais reste essentiel pour des questions de cinétique chimique.

### 1.3.1 Influence de la dimension du système sur les flux rayonnés dans le cas d'une géométrie monodimensionnelle à plans parallèles infinis

Nous proposons de simplifier l'aspect géométrique en considérant un cas monodimensionnel (deux plans parallèles infinis) pour estimer l'échange radiatif entre le cœur gazeux (à température  $T_{\text{gaz}} = 1400K$ ) et les parois (de température  $T_{\text{paroi}} = 400K$ ) d'un système combustif contenant 17% de  $H_2O$  et 7% de  $CO_2$  à pression atmosphérique.

La densité de flux de chaleur convectée pour un coefficient d'échange  $h = 20W/m^2/K$  (ordre de grandeur correspondant à un écoulement convectif de l'ordre de la dizaine de mètres par seconde) s'écrit :

$$q_{\text{conv}} = h(T_{\text{gaz}} - T_{\text{paroi}}) = 2 \times 10^4 W/m^2 \quad (1.1)$$

Pour effectuer le bilan de densité de flux radiatif aux parois, nous écrivons la différence entre les quantités émises et reçues (en considérant une paroi noire) :

$$q_{\text{rad,absorbé}} - q_{\text{rad,émis}} = \varepsilon_{\text{gaz}} \sigma T_{\text{gaz}}^4 - \sigma T_{\text{paroi}}^4 \quad (1.2)$$

où  $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzmann. Comme  $T_{\text{paroi}} = 400K$  et  $T_{\text{gaz}} = 1400K$ , nous négligeons  $q_{\text{rad,émis}}$  par rapport à  $q_{\text{rad,absorbé}}$ . Pour calculer  $\varepsilon_{\text{gaz}}$ , nous allons utiliser la méthode de l'hémisphère équivalent de Hottel pour un mélange isotherme et homogène (on ne tient

donc pas compte de l'épaisseur optique d'une éventuelle couche limite). Cela met en œuvre la notion de longueur équivalente  $l_e$  (dans le cas d'une couche de gaz d'épaisseur  $e$  entre deux plans,  $l_e = 1.8 e$ ). L'émissivité du mélange considéré est obtenue par :

$$\varepsilon_{\text{gaz}} = \varepsilon_{H_2O} + \varepsilon_{CO_2} - \Delta\varepsilon \quad (1.3)$$

où  $\Delta\varepsilon$  est un terme correctif introduit pour tenir compte du recouvrement des bandes de gaz [Siegel and Howell, 1992].

Nous faisons croître  $l_e$  et nous montrons sur la figure 1.1 comment le transfert radiatif devient dominant par rapport au transfert convectif à partir de dimensions métriques.

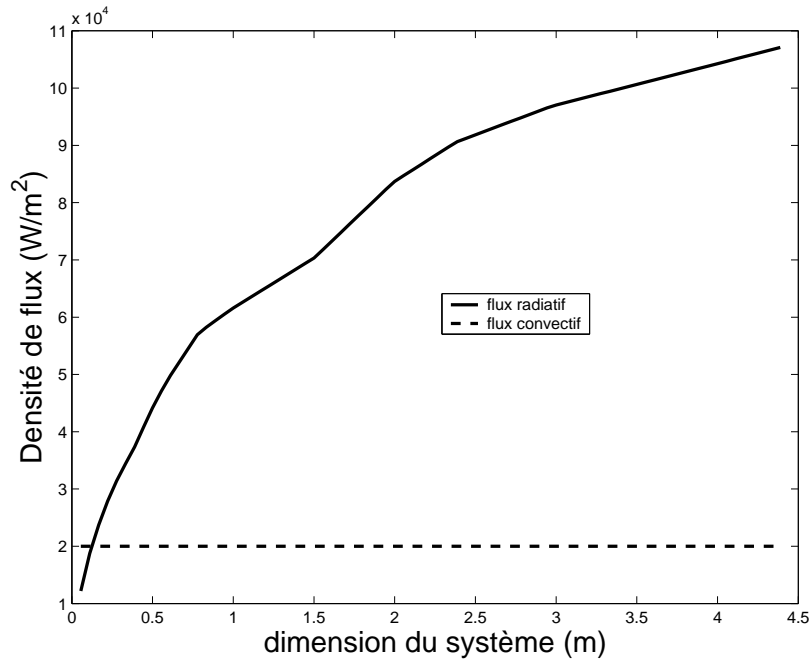


FIG. 1.1 – Comparaison entre flux convectif et radiatif pour le flux de chaleur à la paroi.

Cet exemple simple permet donc de montrer l'influence des effets d'échelles des systèmes qui rendent rapidement prépondérant le phénomène de transfert radiatif par rapport aux effets convectifs dans les dispositifs industriels de grande dimension.

### 1.3.2 Influence des flux radiatifs sur la production des $NO_x$ dans le cas d'une flamme monodimensionnelle à jets opposés.

Les résultats présentés dans ce paragraphe sont issus des travaux de thèse d'Amaury de Guilhem de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001]. Sans trop rentrer dans les détails de description, le dispositif de combustion produisant cette flamme est composé, d'un côté d'un injecteur pour le méthane, et de l'autre d'un injecteur pour l'air. Un front de flamme de quelques millimètres se forme dans la zone de réaction chimique et les gaz brûlés sont éjectés sur les bords (Fig. 1.2).

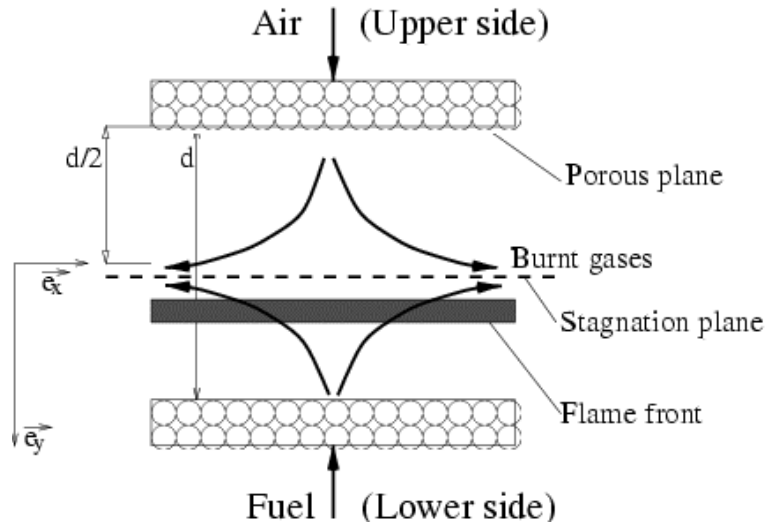


FIG. 1.2 – Flamme de diffusion 1D.

De forts gradients de température apparaissent au front de flamme, les maxima de température se situant autour de  $2400K$ . On peut observer sur la figure 1.3 que la perte de chaleur par rayonnement est faible par rapport aux autres modes de transfert. Les termes sources chimique et conductif sont dominants dans la zone de flamme, zone où la diffusion des espèces s'effectue.

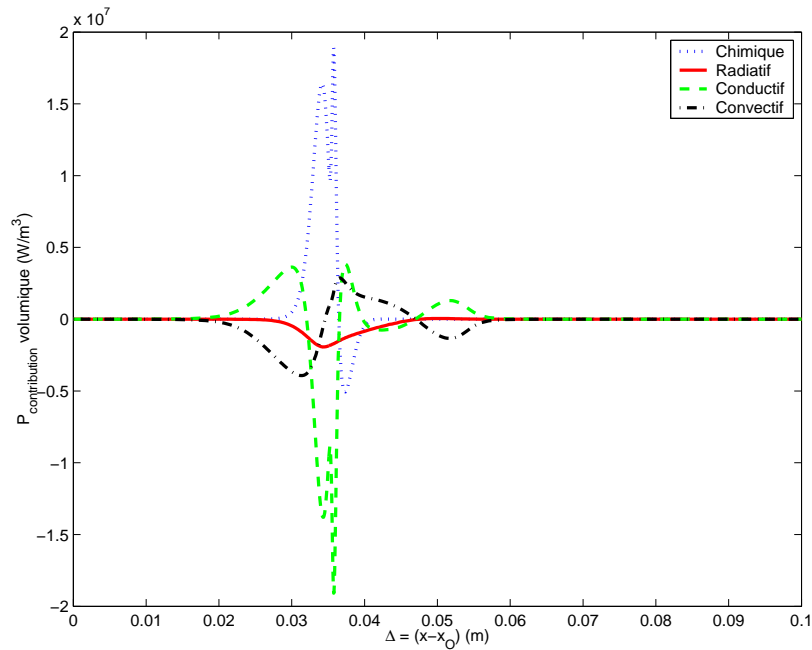


FIG. 1.3 – Comparaison entre flux convectif et radiatif pour une flamme de diffusion.

Dans les figures 1.4 et 1.5, nous présentons respectivement la température maximale de flamme et la fraction molaire de  $NO$  en fonction du taux d'étirement qui représente le paramètre important pour le transfert radiatif. Ce terme dépend des vitesses d'injection du combustible et de l'air, et représente un gradient de vitesses. Lorsqu'il est faible, le rayonnement est plus important car le temps de séjour des espèces rayonnantes est plus long. Ces figures montrent la différence entre deux calculs : un calcul effectué sans prise en compte du rayonnement (légende "*sans rad*"), et un autre avec rayonnement (légende "*rad*").

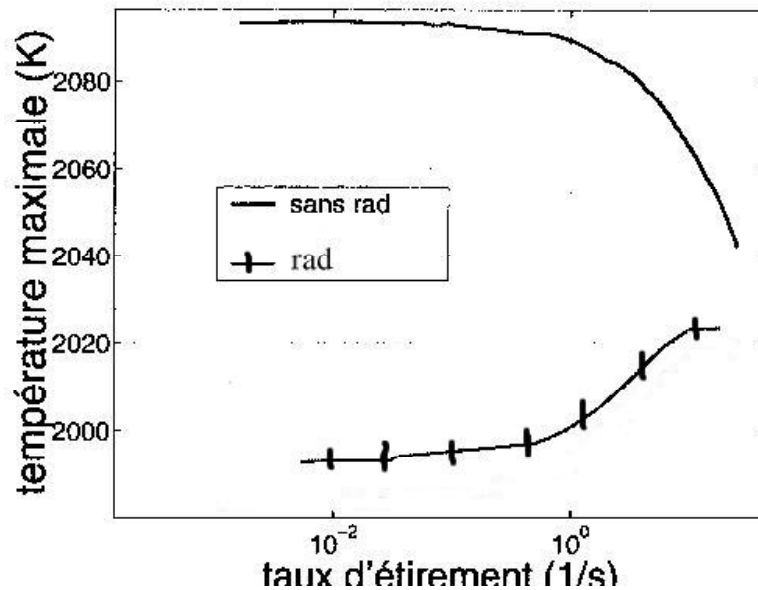


FIG. 1.4 – Influence du rayonnement sur la température de la flamme.

La figure 1.4 montre des différences de  $100K$  sur les températures à faible taux d'étirement, et la figure 1.5 des écarts de l'ordre de 80% sur les  $NO$ . On voit donc sur cet exemple que, malgré la faible dimension des zones réactives, et malgré le fait que le rayonnement apparaît au premier abord comme minoritaire par rapport aux termes chimique, conductif et convectif, il joue un rôle essentiel sur la production des espèces polluantes.

Pour compléter cette première estimation grossière de l'importance relative du rayonnement dans les transferts de chaleur à l'intérieur des systèmes de combustion, nous pouvons citer quelques travaux donnant des chiffres plus précis. Dans les fours industriels et les chambres de combustion, le rayonnement peut représenter de 60% à 90% du transfert de chaleur total suivant la géométrie de l'enceinte [Mbiok and Weber, 2000]. Il peut même atteindre 95% de l'échange total de chaleur dans des fours d'incinération d'ordures [Olsommer et al., 1997] dans une gamme de température allant de 800K à 1300K. Dans un moteur diesel, aux dimensions plus modestes, mais où des températures plus élevées peuvent être rencontrées, Abraham et Magi [Abraham and Magi, 1997] estiment la part du rayonnement de 40% à 60% du transfert de chaleur, pour des températures allant de 1000K à 3000K. Coelho et Carvalho [Coelho and Carvalho, 1996] soulignent également le rôle du rayonne-

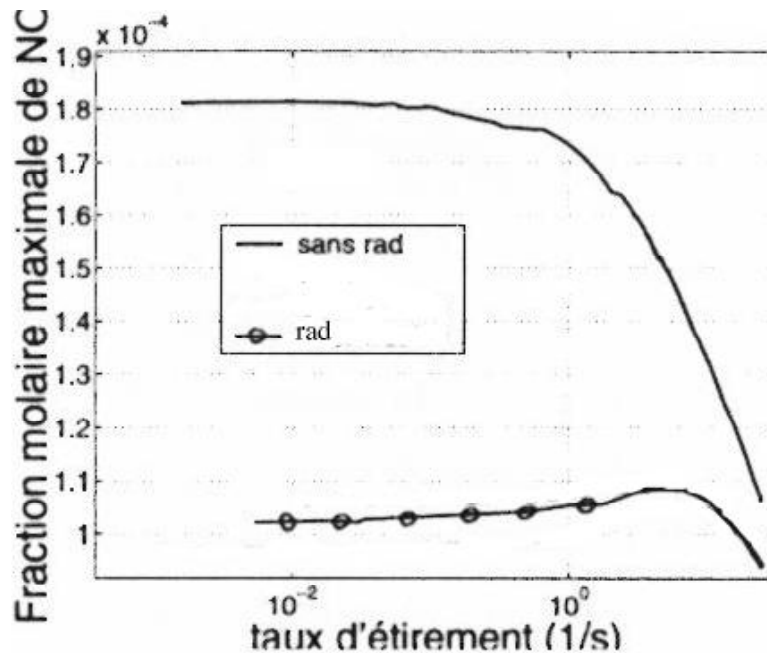


FIG. 1.5 – Influence de la température de la flamme sur la production d'oxydes d'azote.

ment dans les chaudières industrielles, la difficulté de modélisation de ce phénomène, et la part prépondérante de la contribution des suies dans le transfert radiatif.

## 1.4 Sources de rayonnement et interaction matière rayonnement dans les systèmes de combustion

Que ce soit dans des brûleurs, un moteur, ou toute autre enceinte, les produits de la combustion dépendent des solides ou des liquides brûlés. Le rayonnement provient à la fois du gaz et des particules chauffées (suie, cendres volantes, ...), mais aussi des parois du système dans des parts inégales, et avec des variations spectrales très différentes. Une fois émis, il va être réabsorbé par ces mêmes composantes, après avoir été éventuellement réfléchi par les parois, ou diffusé par les particules présentes dans le gaz. La difficulté pour un modèle à rendre compte de la réalité des échanges radiatifs provient bien sûr de la compréhension du phénomène à reproduire, des approximations qui sont faites, mais aussi de données de bases du modèle qui seront pour nous les propriétés radiatives des différentes sources de rayonnement. La précision des résultats obtenus par l'application de ce modèle sera donc au moins limitée par la précision de ces données d'entrée pour chaque type de source de rayonnement.

En étudiant un four fonctionnant au gaz naturel, Liu et al. [Liu et al., 1998] retiennent le  $CO_2$  et la vapeur d'eau ( $H_2O$ ) comme espèces gazeuses radiatives dominantes, car le  $CH_4$  et le  $CO$  restent concentrés près des brûleurs. Il ne faut cependant pas exclure de prendre en

compte les effets radiatifs de ces deux dernières espèces car ils peuvent par exemple s'avérer importants pour la compréhension détaillée des cinétiques d'espèces mineures lors d'un exercice de dimensionnement et d'optimisation environnemental (voir paragraphe précédent). Il arrive que la contribution des gaz aux échanges radiatifs soit négligée dans les milieux à forte concentration de suie [Viskanta and Mengüç, 1987, Mengüç and Viskanta, 1987, Bressloff, 1999, Solovjov and Webb, 2001], en raison de la forte émission de celle-ci étendue sur toutes les longueurs d'onde, alors que l'émission des gaz est restreinte à quelques intervalles spectraux. Une telle démarche simplifie considérablement le problème radiatif du point de vue de la complexité spectrale mais reste délicate car, étant donnée l'intensité des émissions radiatives du  $CO_2$  dans ses bandes les plus intenses, il peut être parfois risqué d'étendre à des cas réels des conclusions tirées à partir d'une sélection de configurations académiques.

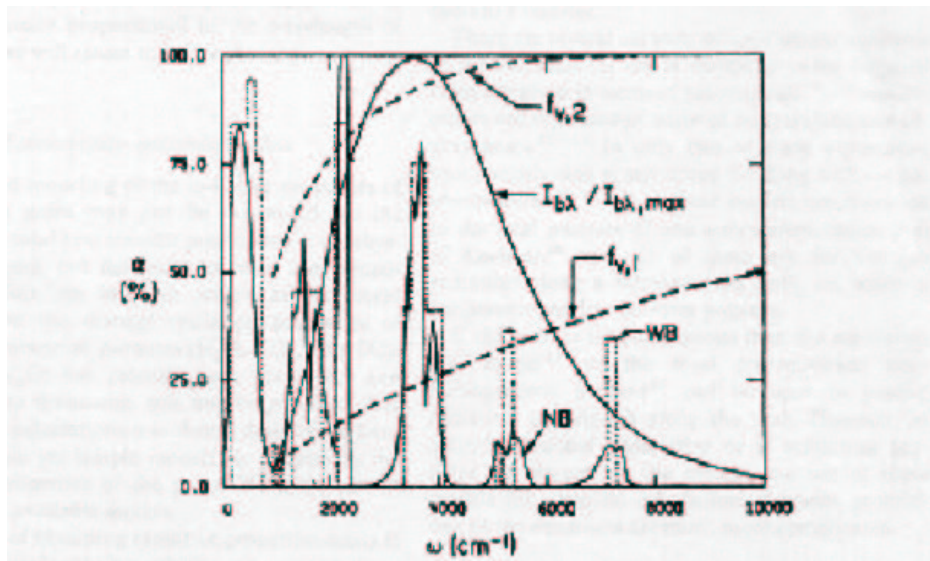


FIG. 1.6 – Absorptivités d'un mélange  $H_2O-CO_2$ -air à partir d'un modèle à bandes étroites (NB), d'un modèle à bandes larges (WB), absorption de la suie pour 2 fractions volumiques ( $f_{v,1} = 10^{-7}$  et  $f_{v,2} = 10^{-6}$ ), et courbe de Planck normalisée. Température  $T=1000\text{K}$ , pression totale  $P_t=1 \text{ atm.}$ , pressions partielles de  $H_2O$  et de  $CO_2=0.1 \text{ atm}$ , et longueur  $L=1\text{m}$  [Viskanta and Mengüç, 1987]. Le spectre de la suie est relativement aisé à représenter, tandis que le spectre des gaz présente de fortes discontinuités.

En ce qui nous concerne, une large gamme de configurations est considérée où les concentrations des particules de suie sont variables, et l'on peut envisager que leur contribution aux échanges radiatifs sera supérieure, de même ordre ou inférieure à celle des gaz (Figs. 1.6, et 1.7) [Bressloff et al., 1997]. C'est pourquoi nous ne pouvons négliger ni la contribution de la suie, ni une description fine de la contribution des gaz pour la production de solutions radiatives de référence. De plus, même dans des situations où les productions de suie sont importantes, les concentrations des éléments radiatifs dans l'ensemble du système peuvent faire apparaître des zones où le rayonnement des gaz domine. Enfin, le gaz émet et absorbe certes sur des intervalles spectraux restreints, mais de manière importante. Il se peut alors qu'il y ait des phénomènes de transfert particuliers à certaines longueurs d'ondes

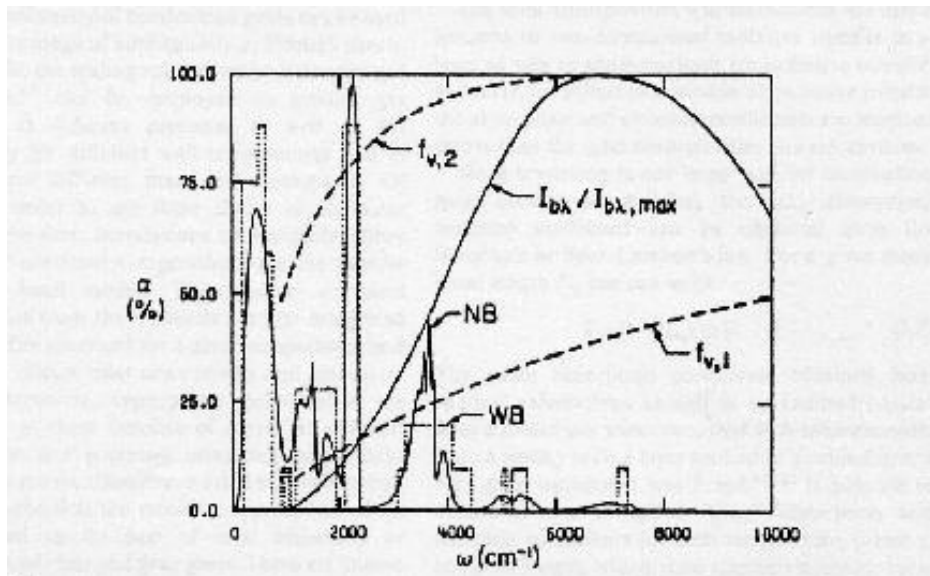


FIG. 1.7 – Absorptivités d'un mélange  $H_2O-CO_2$ -air à partir d'un modèle à bandes étroites (NB), d'un modèle à bandes larges (WB), absorption de la suie pour 2 fractions volumiques ( $f_{v,1} = 10^{-7}$  et  $f_{v,2} = 10^{-6}$ ), et courbe de Planck normalisée. Température  $T=2000K$ , pression totale  $P_t=1$  atm., pressions partielles de  $H_2O$  et de  $CO_2=0.1$  atm, et longueur  $L=0.5m$  [Viskanta and Mengüç, 1987].

dont un modèle excluant les gaz ne peut rendre compte. Le problème que nous traitons dans le milieu gazeux est donc celui d'un spectre continu combiné avec les spectres de raies des gaz.

Comme mentionné ci-dessus, les parois des systèmes de combustion peuvent également rayonner. Leur pouvoir d'émission dépend bien sûr avant tout de la température, mais également de la nature physico-chimique des matériaux, de leur état de surface (rugosité, oxydation), et varie suivant la direction d'émission, et la longueur d'onde. Nous ne porterons pas ici un effort particulier à la description des propriétés radiatives des parois. Mais nous pouvons mentionner les travaux de Luc Claustre à l'Irit et à l'Onera de Toulouse [Claustres et al., 2003] qui, dans un même esprit d'interaction entre les communautés physiciennes et informaticiennes, portent sur ce thème autour des questions de représentation détaillée des phénomènes directionnels et fréquentiels, et de mise en oeuvre dans des codes dédiés à la synthèse d'image.

## 1.5 Des modèles de transfert radiatif aux questions de simulation numérique

Ceci nous amène à évoquer l'étape de transition entre les modèles physiques que nous sommes capables de concevoir et leur utilisation sous forme numérique au sein d'un programme de simulation des transferts d'énergie par rayonnement. Précisons tout d'abord le



type de modèle auquel nous nous intéressons.

Il reste de nombreuses inconnues quant aux propriétés optiques de la large gamme de particules présentes dans les systèmes de combustion. Nous nous limiterons dans ce manuscrit à la prise en compte de la présence éventuelle de particules de suie dans le milieu gazeux. Leur introduction ne pose à priori pas de problème numérique dès lors qu'on laisse de côté les phénomènes de diffusion du rayonnement qu'elles peuvent induire. Des travaux sur cet aspect particulier sont en cours au laboratoire d'énergétique de Toulouse dans le cadre de la thèse de Vincent Eymet, sur des problèmes monodimensionnels. L'intégration de la diffusion dans une configuration de combustion réelle est envisagée dès maintenant comme une suite logique de nos travaux et de ceux d'Eymet dans le cadre de la thèse de Maxime Roger qui débute à l'école des mines d'Albi-Carmaux.

En ce qui concerne les propriétés de parois, nous nous placerons volontairement dans des cas simples de parois noires ou grises. Les comportements de réflexions pris en compte seront alors purement de nature, soit spéculaire, soit diffuse. Nous négligeons en particulier la pénétration du rayonnement dans les matériaux constitutifs des systèmes de combustion. Par cette approximation, nous sommes amenés à représenter des parois sans épaisseur sur lesquelles nous posons les conditions aux limites pour le problème de transfert radiatif au sein de l'enceinte combustive.

En ce qui concerne les propriétés des gaz, au contraire, nous souhaitons garder la possibilité d'une représentation très détaillée de leur physique spectrale. Nous utiliserons des modèles statistiques à bandes étroites qui ont fait maintenant la preuve, sans ambiguïté, d'un bon compromis en terme de complexité et de précision pour les applications en combustion [Taine and Soufiani, 1999].

Lors de la traduction numérique de ce type de modèle, les difficultés principales sont celles de l'approximation des intégrales volumiques angulaires et spectrales ; le verrou principal étant sans ambiguïté celui de l'intégration spectrale. De ce point de vue nous nous appuierons essentiellement sur le travail de thèse de de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001], qui a proposé des avancées significatives de la méthode de Monte Carlo dans ce contexte avec à la fois un exercice rigoureux de reformulation des écritures intégrales, une optimisation systématique des lois de tirage, et la mise en œuvre de techniques d'analyse telles que l'analyse en puissances nettes échangées et le calcul de sensibilités.

D'un point de vue algorithmique, la difficulté essentielle provient de la représentation des conditions aux limites dont nous parlions précédemment à propos des modèles d'interaction entre le rayonnement et des parois opaques sans épaisseur. Ces parois définissent une enveloppe dont la complexité peut être très élevée lorsqu'il s'agit d'étudier des systèmes industriels avec l'ensemble des détails (tuyauteries, échangeurs) qui les composent. Le suivi d'un chemin optique (trajectographie) au sein d'une telle géométrie peut se traduire par des coûts informatiques très élevés si une forte attention n'est pas portée à l'optimisation de la structure algorithmique correspondante. De ce point de vue, nous pouvons profiter du très large panel des travaux de recherche effectués dans le domaine de la synthèse d'images,

en particulier autour des concepts de droites discrètes, voxélisation, et grilles hiérarchiques. Au delà de leur avantage numérique, ces concepts algorithmiques ont également de fortes conséquences en termes de souplesse, de mise en œuvre et de programmation. Ce point correspond manifestement à un bénéfice possible important dans le domaine du transfert radiatif en génie des procédés, où la gestion de la géométrie se fait traditionnellement de façon *archaïque*. Par archaïque j'entends ici que le codage est dédié à une géométrie donnée, habituellement assez simple, et le passage au même problème avec une géométrie différente demande la réécriture du code. Conscients de ce problème, on commence à voir apparaître une réflexion sur ce thème et la souplesse et la généralité des codes évoluent régulièrement vers des descriptions de plus en plus évoluées de l'environnement géométrique [Tessé, 2001, Zeeb et al., 2001, Iacona et al., 2002].

## 1.6 Relation entre transfert radiatif en génie des procédés et synthèse d'images

Comme nous venons de le voir, le travail qui suit va faire appel au savoir-faire de deux communautés scientifiques : celle de synthèse d'image (pour la prise en compte algorithmique des effets de la géométrie et la souplesse de mise en œuvre informatique), et celle du transfert radiatif en génie des procédés (principalement pour l'intégration de l'équation de transfert radiatif en présence de spectres de gaz) (Fig. 1.8). C'est au passage l'occasion d'un rapprochement entre ces deux communautés, dont les démarches respectives (qui se traduisent par une recherche commune de simulation précise du transfert radiatif dans une géométrie complexe) sont motivées par des préoccupations d'apparence très différentes.

La communauté physicienne du génie des procédés désire appliquer les modèles de propriétés infra-rouge des gaz qu'elle a établis pour offrir des simulations de référence du transfert radiatif dans des enceintes de combustion industrielles. Elle est donc amenée à se confronter à des solutions données comme *exactes* par des codes de références, des résultats expérimentaux, ou des solutions analytiques dans quelques cas simples. Il est alors important de connaître la précision des solutions proposées par rapport à ces références : elle a des critères de jugement qui sont d'ordre quantitatifs. En parallèle, il s'agit également d'aller vers une meilleure compréhension de la physique des phénomènes simulés. Et, dans ce but, elle développe des outils d'analyse tels que des matrices d'échange, ou de sensibilités.

La communauté informaticienne de la synthèse d'images a pour soucis majeur de produire, par le calcul, des images les plus conformes possibles avec la réalité visuelle, ou avec l'affichage d'une caméra infra-rouge par exemple (Fig. 1.9). Pour cela, finalement, le strict respect des phénomènes physiques importerait peu si l'on était capable de calculer une image d'apparence réaliste à partir d'un modèle même irréaliste. Les critères de jugement sont ici purement qualitatifs (ou esthétiques). Cela est particulièrement vrai par exemple dans le cas de l'animation où l'acuité de perception de l'oeil permet de faire une économie de réalisme sur chaque image qui défile : quand on voit un film on ne distingue pas les détails de chaque image. Malheureusement, sur une image fixe les détails sont examinables à loisir et on ne va vers plus de réalisme qu'en simulant les phénomènes sous-jacents à la construction de l'image.

Un autre point à souligner vient du caractère subjectif de l'appréciation par l'oeil humain. En physique, l'écart numérique à une solution de référence ne va pas varier en fonction de l'observateur. Alors qu'en synthèse d'images, chaque oeil étant différent, il n'y a pas de vérité absolue dans l'obtention d'un résultat, dès lors qu'on s'est défait des défauts grossiers de l'image comme la disparition d'objets, une mauvaise définition de contour des ombres, etc.

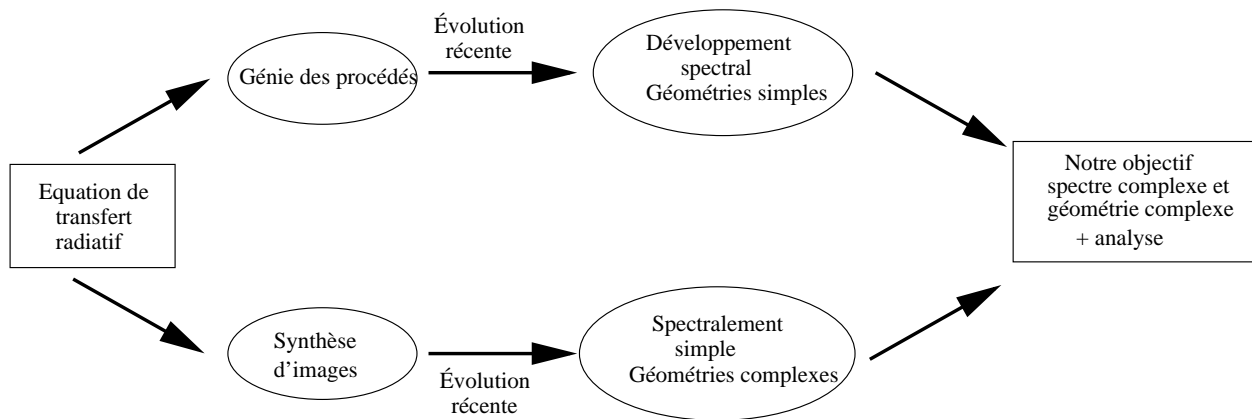


FIG. 1.8 – Démarche générale de la thèse.

En dehors de ces considérations sur les motivations des deux mondes qui se trouvent reliés par le présent travail, il existe quelques autres différences fondamentales qu'on peut dès maintenant énoncer :

- Les modélisations du transfert radiatif font intervenir les spectres infra-rouges des espèces gazeuses présentes dans la scène ou le système alors que la synthèse d'image reste généralement dans le domaine visible où le spectre est souvent plus simple. Cependant, on peut facilement imaginer des applications nécessitant le calcul d'une image infra-rouge (dans le domaine militaire notamment) et demandant donc la manipulation d'un spectre de gaz.
- L'obtention d'une image suppose la présence d'un capteur optique, de type appareil photographique numérique par exemple (ou tout simplement un oeil humain), alors que les besoins de simulations radiatives en génie des procédés n'ont pas nécessairement un objet capteur comme point de départ (puissances radiatives volumiques, puissances radiatives pariétales, etc).
- En synthèse d'image, les sources de rayonnement sont le plus souvent très localisées alors que dans un système de combustion tous les éléments de la scène, y compris le gaz, vont émettre dans l'infra-rouge, et bien sûr absorber et diffuser .

Ces différences, pour importantes qu'elles soient, ne doivent pas masquer les analogies qui existent au premier rang desquelles la résolution de l'équation de transfert radiatif et le souci de réduire le temps de calcul. De ce dernier point de vue, des techniques d'accélération du calcul ont été développées de façon séparée et doivent être utilisées ensemble pour arriver à une technique de résolution tirant profit des connaissances, du travail, mais aussi de l'état d'esprit forcément différent au départ des deux communautés. Le calcul et l'utilisation de sensibilités du résultat aux paramètres du problème sont une alternative intéressante au

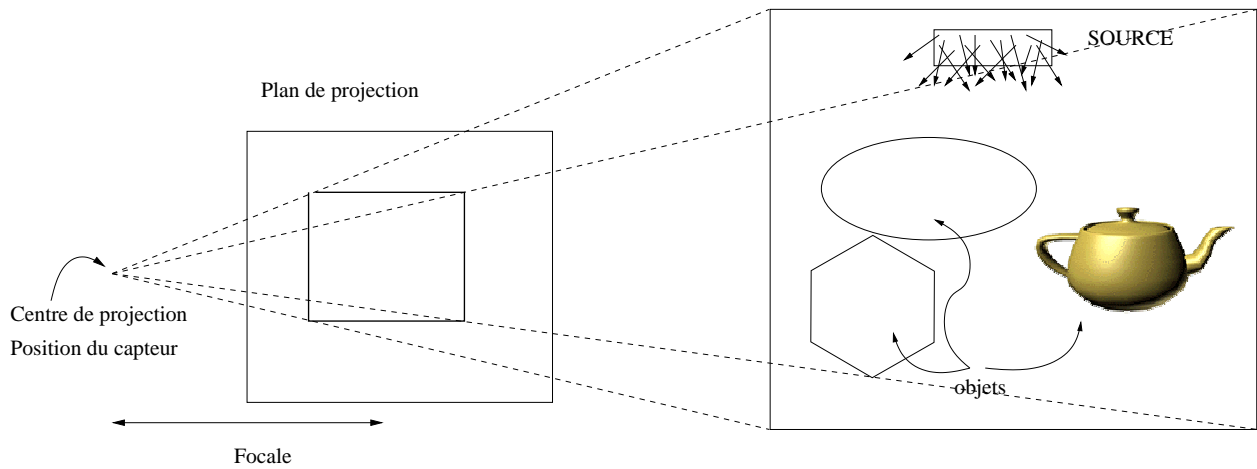


FIG. 1.9 – Problématique en synthèse d'image. L'observateur voit la scène composée d'objets sur le plan de l'écran et suivant un certain point de vue. L'écran est composé d'une matrice de pixels qui sont des éléments de surface indivisibles. Les objets de la scène sont éclairés par une source de lumière, et on cherche à déterminer comment les objets sont éclairés directement par la source ou indirectement par les autres objets.

re-calcul systématique de la solution en entier lors de variations limitées de paramètres. Les matrices d'échange développées en génie des procédés permettent d'autre part l'analyse d'un bilan en termes d'importance relative des contributions des composantes du système. Ces deux derniers outils sont particulièrement intéressants dans le domaine de l'inverse-design. De ce point de vue, ils peuvent par exemple constituer une aide pour le positionnement des brûleurs dans une chambre de combustion pour obtenir une température donnée dans une zone définie. En retour, on peut bien sûr envisager leur utilisation pour résoudre le problème tout à fait analogue du positionnement des sources de lumière dans une pièce pour obtenir un éclairage donné en un endroit défini.

# Chapitre 2

## Modélisation physique des transferts radiatifs

### 2.1 Physique du rayonnement

Cette partie a pour but de définir les notions fondamentales qui seront utilisées dans la suite de l'exposé. Elle porte sur la physique du rayonnement, les modèles de représentation du spectre des gaz, l'établissement de l'équation de transfert radiatif et les méthodes de résolution communément employées en transfert radiatif. Elle ne constitue évidemment pas un cours de rayonnement tant le sujet est vaste et complexe. Nous commençons par nous intéresser à l'aspect quantique du rayonnement pour aller vers les grandeurs macroscopiques telles que la luminance, le flux radiatif, etc.

On opère une distinction parmi les longueurs d'onde du spectre électromagnétique entre rayonnement visible, rayonnement infra-rouge, ondes radio, rayonnement UV, X, ou  $\gamma$  (Fig. 2.1). Ces diverses zones spectrales de rayonnement sont arbitraires mais, au delà de la diversité de leur source, elles s'imposent à nous parce qu'elles nécessitent des récepteurs de types différents. Ainsi, l'œil humain est sensible au rayonnement visible, mais pas au domaine infra-rouge auquel nous nous intéressons plus particulièrement dans le cadre de ce travail.

Lors de la caractérisation spectrale du rayonnement observé, on mentionne communément trois types de spectres : les spectres continus, les spectres de raies d'émission, et les spectres de raies d'absorption. Les lois empiriques qui décrivent les conditions de formation de ces différents spectres portent le nom du physicien allemand G. Kirchhoff qui les publia en 1859 en collaboration avec R. Bunsen. Elles s'expriment de la manière suivante :

1. Un gaz à pression élevée, un liquide ou un solide, s'ils sont chauffés, émettent un rayonnement continu qui contient toutes les couleurs.
2. Un gaz chaud, à basse pression, émet un rayonnement uniquement pour certaines couleurs bien spécifiques : le spectre de ce gaz présente des raies d'émission (Fig. 2.2).
3. Un gaz froid, à basse pression, s'il est situé entre l'observateur et une source de rayonnement continu, absorbe certaines couleurs, produisant ainsi dans le spectre des raies d'absorption. Ce gaz absorbe les mêmes couleurs qu'il émettrait s'il était chaud (Fig.

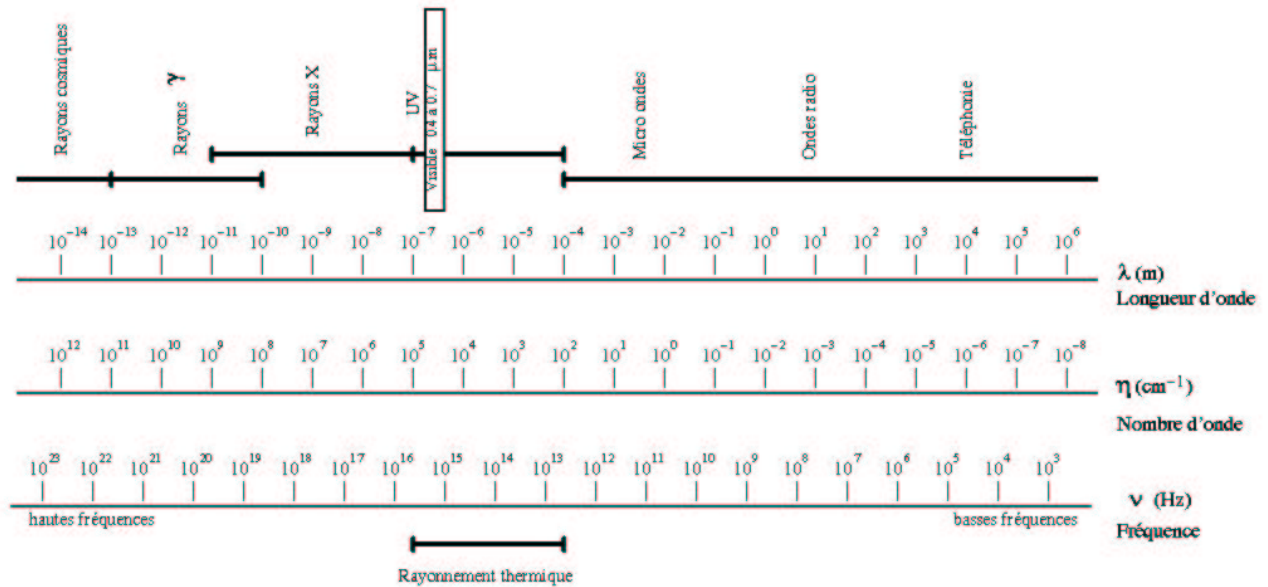


FIG. 2.1 – Découpage du spectre suivant la longueur d'onde.

2.3).

Pour comprendre l'origine de ces lois, il a fallu attendre la révolution de la physique quantique qui a permis de répondre à un des seuls problèmes résistant à l'édifice théorique bâti jusqu'alors par la physique classique : la courbe d'émission du corps noir.

### 2.1.1 Processus d'émission et d'absorption

Nous nous limitons ici à évoquer brièvement l'origine de l'émission du rayonnement thermique, sans aborder un éventail plus large de sources de rayonnement dans d'autres longueurs d'onde comme par exemple les réactions de fusion thermonucléaire au sein des étoiles. Nous présentons également la façon dont le rayonnement interagit avec le milieu gazeux par les phénomènes d'émission et d'absorption et nous établirons l'équation décrivant la propagation du rayonnement dans un milieu participant : l'équation de transfert radiatif.

L'émission ou l'absorption de photons dans un gaz moléculaire se fait par changement d'état énergétique de la molécule. Les niveaux d'énergie sont séparés en niveaux électroniques, niveaux vibrationnels, et niveaux rotationnels (Fig. 2.4). Les transitions électroniques correspondent à des sauts d'énergie relativement importants, les transitions vibrationnelles à des sauts d'énergie moins importants, et les transitions rotationnelles à des sauts d'énergie encore plus faibles <sup>1</sup>.

<sup>1</sup>En rayonnement thermique, le domaine spectral traité concerne les transitions vibrationnelles et rotationnelles.

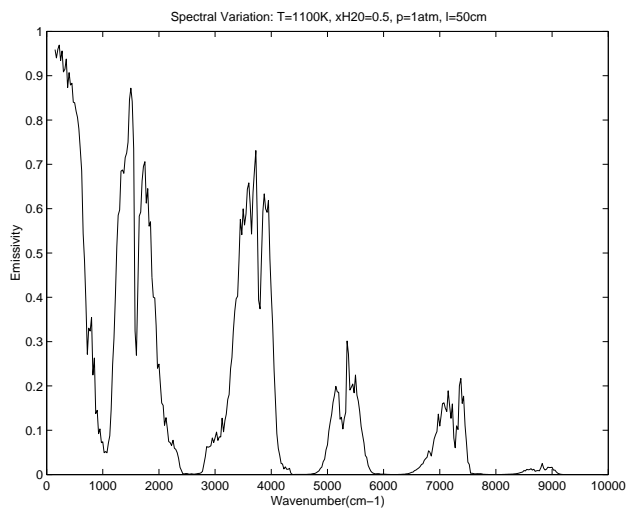


FIG. 2.2 – Exemple de spectre de gaz en émission.

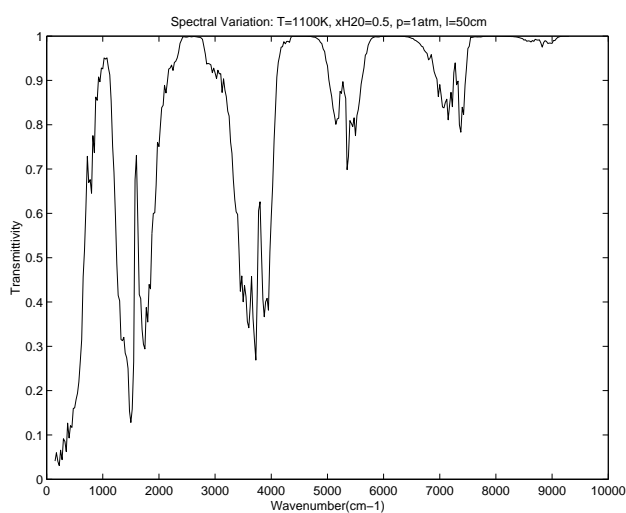


FIG. 2.3 – Exemple de spectre de gaz en absorption.

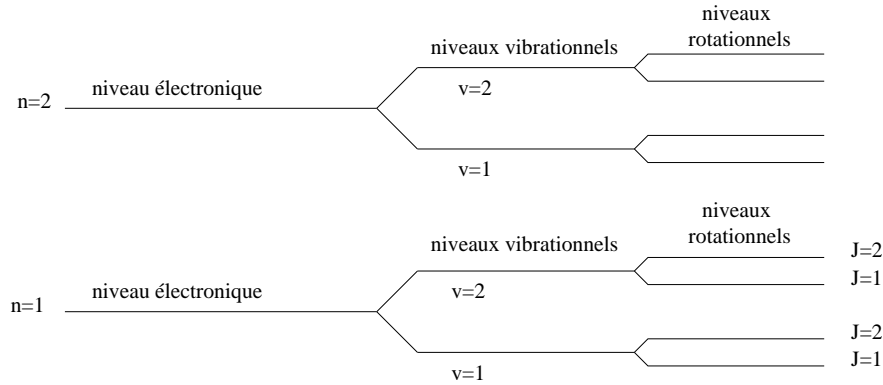


FIG. 2.4 – Quantification des niveaux d'énergie dans une molécule.

Considérons le cas simple d'une molécule fictive possédant deux niveaux d'énergie : un niveau excité noté 2 d'énergie  $E_2$  et un niveau fondamental noté 1, d'énergie  $E_1$ . Si une molécule de ce type se trouve dans l'état fondamental, elle peut accéder à l'état excité en absorbant un photon d'énergie  $E = E_2 - E_1$ . De même, si une molécule se trouve dans l'état excité sur le niveau 2, elle peut se désexciter en libérant un photon d'énergie  $E$ . Absorption et émission apparaissent alors comme deux phénomènes opposés, retirant du milieu ou libérant des photons d'énergie donnée  $E$ . Autrement dit, une transition entre deux niveaux distincts correspond à une énergie déterminée du photon émis ou absorbé, et donc à un rayonnement à une fréquence donnée puisque l'énergie  $E$  d'un photon est reliée à la fréquence  $\nu_0$  de l'onde électromagnétique correspondante par la relation :

$$E = h\nu_0$$

où  $h$  est la constante de Planck. Les transitions entre états moléculaires sont associées en fait à trois phénomènes identifiés qu'on appelle émission spontanée, émission induite, ou absorption (d'un photon d'énergie  $E$ ).

Sur une population de molécules identiques dont  $N_2$  sont dans l'état excité, et  $N_1$  dans l'état fondamental, l'évolution du nombre de molécules dans le temps (et donc l'interaction entre les molécules et le rayonnement) est décrite par les équations d'Einstein pour l'émission spontanée, l'émission induite, et l'absorption.

### Émission spontanée

Lorsqu'une molécule se trouve dans un état excité sur le niveau 2, elle va retourner spontanément à l'état fondamental en émettant un photon d'énergie  $E$ , au bout d'un temps moyen  $\tau$  (avec une distribution des temps de retour traduisant l'absence de mémoire des molécules pour ce phénomène). L'évolution des populations de molécules sur les deux états concernés par la transition est alors donnée par la relation :

$$-\frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{\partial N_1}{\partial t} = N_2 A_{21} \quad (2.1)$$



où  $A_{21}$  est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée. Cette grandeur a la dimension de l'inverse d'un temps, et représente en fait l'inverse du temps moyen de désexcitation  $\tau$  du niveau 2 vers le fondamental. La variation du nombre  $N_2$  de molécules sur le niveau 2 par le phénomène d'émission spontanée est proportionnelle à  $N_2$ . On peut noter par ailleurs, que l'émission des photons dans le milieu se fait dans ce processus de façon isotrope (sans privilégier de directions particulières).

### Émission induite

Une émission peut également être observée par suite d'un phénomène de résonance entre une molécule occupant un état de niveau 2 et un photon d'énergie  $h\nu_0$  correspondant à l'écart énergétique entre les niveaux 1 et 2. Cette émission se fait de façon cohérente : le photon émis a les mêmes caractéristiques que le photon résonant. En particulier, il a la même fréquence, la même quantité de mouvement, et donc la même direction <sup>2</sup>. Comme précédemment nous donnons l'équation d'évolution des populations  $N_2$  et  $N_1$  sous l'effet du phénomène considéré :

$$-\frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{\partial N_1}{\partial t} = N_2 B_{21} \rho_\nu \quad (2.2)$$

où  $B_{21}$  est le coefficient d'Einstein pour l'émission induite, et  $\rho_\nu$  est la densité d'énergie radiative. Nous faisons donc apparaître dans cette équation une grandeur donnant une description du champ d'énergie de façon locale. L'interaction entre rayonnement et milieu gazeux dépend clairement de  $\rho_\nu$ , ce qui est finalement assez intuitif. Toutefois cette grandeur ne donne pas d'indication sur la propagation du rayonnement et ne permet donc pas d'établir une équation de transfert. Nous y reviendrons plus tard dans ce document.

### Absorption

C'est le phénomène inverse de l'émission et il conduit une molécule à passer à un état d'énergie plus grand par absorption d'un photon correspondant à l'énergie de transition E. Il dépend aussi de la densité d'énergie radiative  $\rho_\nu$  et l'équation d'Einstein correspondante est tout à fait similaire à celle donnée pour l'émission induite :

$$+\frac{\partial N_2}{\partial t} = -\frac{\partial N_1}{\partial t} = N_1 B_{12} \rho_\nu \quad (2.3)$$

Dans cette équation,  $B_{12}$  est le coefficient d'Einstein pour l'absorption.

Si maintenant, nous quittons la situation fictive d'une molécule à deux niveaux sur laquelle nous nous avons posé quelques bases simples, pour la situation réelle où la molécule possède plusieurs niveaux d'énergie, il n'existe pas une seule, mais plutôt un ensemble de transitions permises de la molécule qui forme un spectre de raies (en absorption ou en émission) dans l'espace des fréquences. A une transition donnée correspond une fréquence donnée  $\nu_0$ . Dans la réalité, une transition n'est cependant pas associée à une fréquence unique, et des photons de fréquence voisine de  $\nu_0$  peuvent aussi être absorbés ou émis ; on parle d'élargissement de raies. On associe donc à chaque transition une fonction de densité de probabilité

---

<sup>2</sup> Cette propriété est à l'origine de l'effet laser.

$F(\nu - \nu_0)$  de voir le photon libéré ou absorbé avec une fréquence  $\nu$  autour de  $\nu_0$ . Cette fonction symétrique par rapport à  $\nu_0$  (où elle présente un maximum) est communément appelée profil de raie. Il est à noter, que pour une même molécule, les fréquences susceptibles d'être absorbées sont les mêmes que celles susceptibles d'être émises.

Il existe plusieurs causes d'élargissement de raie, et la première cause que nous pouvons citer est l'élargissement naturel dû à la durée de vie d'un niveau donné. Nous avons mentionné qu'une molécule quitte spontanément un état excité au bout d'un temps caractéristique  $\tau$  qui est la durée de vie de ce niveau. Alors, l'inégalité d'Heisenberg reliant l'énergie et le temps fait apparaître une largeur  $\Delta E_2$  pour le niveau 2 (on pose ici  $\tau = \Delta t$ ) :

$$\Delta E_2 \Delta t \geq \hbar \quad \rightarrow \quad h \Delta \nu \tau \geq \hbar \quad \text{d'où} \quad \Delta \nu \approx \frac{1}{2\pi\tau} \quad (2.4)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck réduite. Ce phénomène est caractérisé par un profil de raie de type lorentzien :

$$F_L(\nu - \nu_0) = \frac{\gamma_L}{\pi[\gamma_L^2 + (\nu - \nu_0)^2]} \quad (2.5)$$

où  $\gamma_L$  est la demi-largeur Lorentz à mi-hauteur.

Les niveaux d'énergie d'une molécule peuvent également être dépeuplés par les chocs avec les autres molécules du milieu. On peut définir une durée de vie du niveau par collision et il s'ensuit un élargissement de raie de même nature que l'élargissement naturel ; le profil de raie est donc aussi de type lorentzien. Nous pouvons raisonner de la même façon que pour le phénomène d'émission spontanée, en prenant cette fois comme temps caractéristique le temps entre deux collisions  $\Delta t_{\text{coll}}$ . Alors on peut poser :

$$h \Delta \nu \Delta t_{\text{coll}} \approx \hbar \quad (2.6)$$

De plus, on peut établir simplement en théorie statistique des gaz un premier modèle pour  $\Delta t_{\text{coll}}$  :

$$\Delta t_{\text{coll}} \propto \frac{\sqrt{T}}{p} \quad (2.7)$$

dans lequel  $T$  est la température, et  $p$  la pression du milieu. Il s'ensuit :

$$\Delta \nu \approx \alpha \times \frac{p}{\sqrt{T}} \quad (2.8)$$

où  $\alpha$  est une constante.

Enfin, on peut citer une troisième cause d'élargissement qui est le déplacement fréquentiel que subit une onde émise par une source en mouvement. Comme il existe une distribution de vitesse dans le gaz, tant en direction qu'en valeur absolue, une transition donnée se fera pour une plage de fréquences d'autant plus grande que la distribution sera large. Le profil de raie est ici de type Doppler :

$$F_D(\nu - \nu_0) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_D} \exp \left[ - \frac{(\nu - \nu_0)^2 \ln 2}{\gamma_D^2} \right]$$

où  $\gamma_D$  est la demi-largeur Doppler à mi-hauteur et est donnée par :

$$\gamma_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\ln 2 \frac{2k_B T}{m}}$$

pour une molécule de masse  $m$  dans un milieu de température thermodynamique  $T$ , ayant une distribution de vitesse de type Maxwell-Boltzmann ( $k_B$  est la constante de Boltzmann).

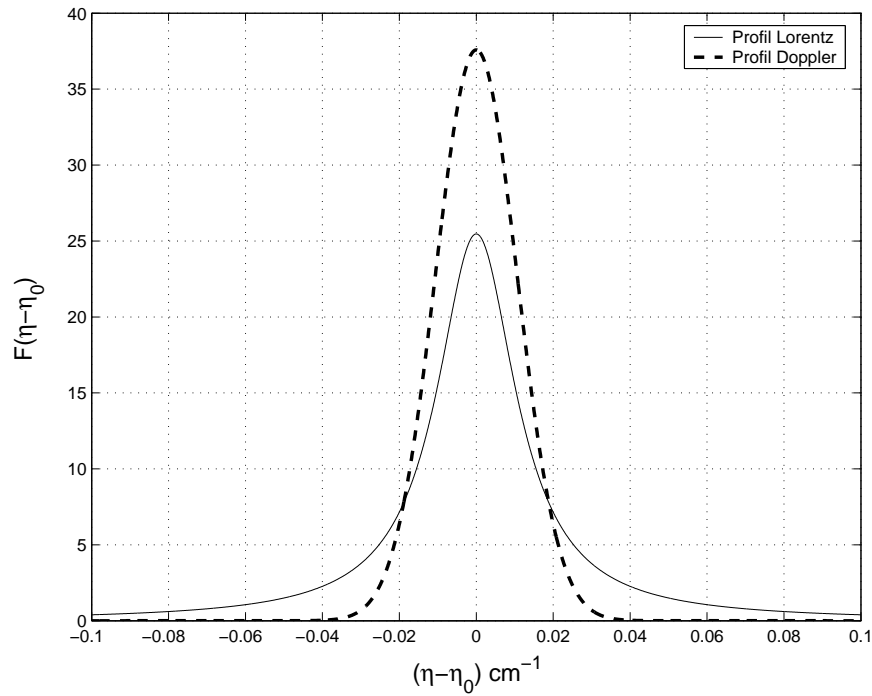


FIG. 2.5 – Profil de raie Doppler et Lorentz pour une même demi-largeur à mi-hauteur  $\gamma = 0.0125 \text{ cm}^{-1}$ .

La comparaison entre les profils de raie de type Doppler et de type Lorentz de même demi-largeur à mi-hauteur (Fig. 2.5) montre que le premier domine au voisinage du centre  $\nu_0$  de la raie, mais qu'il s'atténue plus rapidement pour laisser le second dominer dans les ailes de raies.

Quand on utilise les propriétés quantiques des gaz pour aboutir à des modèles de propriétés radiatives, on est forcé de tenir compte de la forme des raies résultant des importances relatives des phénomènes d'élargissement rencontrés. On peut être amené à choisir entre un profil de raie de type Lorentz, Doppler ou Voigt, ce dernier étant une combinaison des deux précédents. En pratique, dans les conditions de température et de pression communément

rencontrées dans les applications en combustion, il paraît raisonnable de considérer des profils de raie de type Lorentz [Taine and Soufiani, 1999].

## 2.1.2 Grandeurs caractéristiques

### 2.1.2.1 Coefficient d'absorption

Nous avons énoncé les trois mécanismes d'interaction rayonnement matière d'émission spontanée, induite, et d'absorption. Les équations d'Einstein (Eqs. 2.1, 2.2 et 2.3), nous permettent d'écrire l'évolution d'une population de molécules dans un état énergétique donné en connaissant la densité d'énergie radiative  $\rho_\nu$ . Dans ce qui suit, nous allons établir l'équation de transfert radiatif qui permet de décrire l'évolution spatiale (et temporelle si besoin est) de l'énergie transportée. Pour cela, nous commençons par considérer une situation où une population de  $N$  photons de mêmes caractéristiques se propagent dans un cylindre de section  $S$  où se trouve une distribution homogène de molécules dans un volume  $S \cdot dl$ , chaque molécule ayant le même effet que si elle était seule (Fig. 2.6).

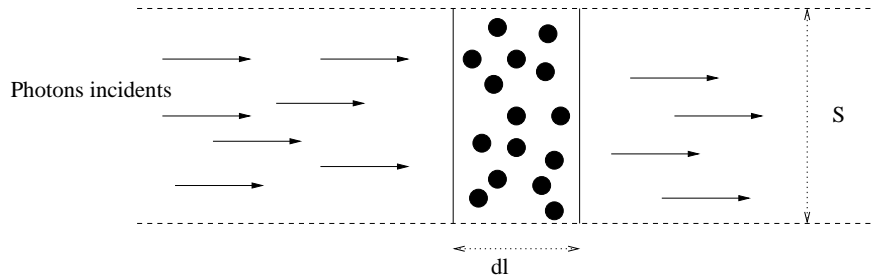


FIG. 2.6 – Flux de photons incidents sur une distribution homogène de molécules.

On suppose que les molécules ont absorbé  $dN_a$  photons, et on définit la section efficace d'absorption :

$$\sigma_a = \frac{dN_a}{N} S \quad (2.9)$$

On peut également définir une section efficace d'absorption par unité de volume :

$$\kappa_a = \frac{\sigma_a}{S dl} \quad (2.10)$$

L'inverse de cette grandeur est homogène à une distance, représente le libre parcours moyen d'un photon et sera désignée dans la suite du document par le terme de coefficient d'absorption<sup>3</sup>. Le coefficient d'absorption décrit l'atténuation que subit une population de photons de mêmes caractéristiques (rayon lumineux) le long d'un trajet optique. Dans un milieu réel, le coefficient d'absorption sera bien sûr lié au type de molécules présentes dans le gaz, à leur concentration, et également aux profils des raies associées à chaque molécule.

<sup>3</sup>De façon très similaire, on peut établir un coefficient de diffusion en considérant une distribution homogène de centres diffuseurs, à la place d'une distribution d'absorbeurs

Si on remplace  $\sigma_a$  par son expression de l'équation 2.9 dans l'équation 2.10, et en remarquant que le nombre de photons absorbés  $dN_a$  représente une variation  $-dN$  sur l'intervalle  $dl$ , alors on peut écrire :

$$\kappa_a dl = -\frac{dN}{N} \quad (2.11)$$

Soit en intégrant cette équation sur une distance  $l$  et en posant comme condition initiale que le nombre de photons avant absorption était  $N_0$  :

$$N = N_0 \exp[-\kappa_a l] \quad (2.12)$$

Cette équation établit le nombre de photons qui n'ont pas été absorbés par le milieu gazeux. L'expression  $\exp[-\kappa_a l]$  est appelée transmittivité et sera noté  $\tau$  dans la suite du document <sup>4</sup>, et le produit  $\kappa_a l$  est l'épaisseur optique. Cette atténuation exponentielle est bien connue sous le nom de loi de Beer-Lambert.

### 2.1.2.2 Luminance et grandeurs intégrées

Pour maintenant donner une information sur les photons présents dans le milieu, nous passons par une description statistique des population de photons en introduisant la fonction de distribution photonique  $f = f_\nu(\vec{r}, \vec{p}, t)$  (ici  $\vec{p}$  est l'impulsion). Comme nous traitons des photons, le module de l'impulsion est le même pour l'ensemble de la population et la fonction de distribution photonique peut alors être écrite :  $f = f_\nu(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_\nu(\vec{r}, \vec{u}, t)$  (où  $\vec{u}$  est la direction). Cette grandeur associée à un coefficient d'absorption monochromatique (noté  $\kappa_\nu$  où  $\nu$  est la fréquence associée aux photons absorbés, ou plus tard dans ce document simplement  $\kappa$  quand une écriture statistique fait perdre la stricte correspondance entre  $\nu$  et le coefficient d'absorption) permet d'écrire une fonction de transfert des populations de photons. Comme nous souhaitons plutôt établir une équation portant sur l'énergie transportée, nous introduisons la luminance monochromatique <sup>5</sup> définie par :

$$L_\nu = f(\nu, \vec{r}, \vec{u}, t) h\nu c \quad (2.13)$$

où  $\vec{r}$  est un point du milieu,  $\vec{u}$  une direction de propagation,  $t$  le temps, et  $c$  la vitesse de la lumière dans le milieu. Comme nous considérerons des problèmes stationnaires, nous n'écrirons plus la dépendance temporelle de la luminance à partir de maintenant.

Cette grandeur est l'équivalent pour les photons de la fonction de distribution des vitesses des molécules d'un gaz. L'équation d'évolution de la luminance que nous serons amenés à poser est alors l'équivalent de l'équation de Boltzmann pour les gaz. On peut faire le lien avec la densité d'énergie  $\rho_\nu$  apparaissant dans les équations d'Einstein (Eqs. 2.2, et 2.3) en

<sup>4</sup>A ne pas confondre avec la durée de vie moyenne d'un niveau, notée également  $\tau$  dans les paragraphes précédents.

<sup>5</sup> Dans les ouvrages de langue anglaise, la luminance est désignée par le terme d'"Intensity", ce qui occasionne parfois des confusions pour un lecteur débutant.

intégrant la luminance monochromatique sur l'ensemble des directions (premier moment de la fonction de distribution photonique) :

$$\rho_\nu = \frac{1}{c} \int_{4\pi} L_\nu d\Omega \quad (2.14)$$

La luminance monochromatique  $L_\nu$  est la description la plus détaillée que nous emploierons pour le champ radiatif. On trouve aussi communément employées des valeurs intégrées de cette variable comme la densité d'énergie avec laquelle nous venons de faire le lien. On emploie ainsi souvent la luminance intégrée sur le domaine fréquentiel :

$$L = L(\vec{r}, \vec{u}) = \int_0^\infty L_\nu d\nu \quad (2.15)$$

La luminance intégrée sur le domaine fréquentiel  $L(\vec{r}, \vec{u})$  nous permet d'introduire une nouvelle grandeur fondamentale dans les développements ultérieurs de ce document. On définit le vecteur flux radiatif en écrivant le deuxième moment de la fonction de distribution photonique :

$$\vec{q}_r(\vec{r}) = \int_{4\pi} L(\vec{r}, \vec{u}) \vec{u} d\Omega \quad (2.16)$$

Il a le même rôle que le vecteur flux conductif, qui gouverne le transport de l'énergie cinétique de translation ou de l'énergie interne, et représente le transport de l'énergie radiative au point repéré par le vecteur  $\vec{r}$ .

Alors, le terme source radiatif est obtenu en écrivant la divergence du vecteur flux radiatif :

$$S_r(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_r(\vec{r})$$

Il représente simplement le bilan énergétique radiatif au point de coordonnée  $\vec{r}$ . Le calcul du terme source radiatif en chaque point d'une enceinte combustive permettra par conséquent d'établir une cartographie des échanges radiatifs dans le système.

Dans le cas particulier d'un milieu à l'équilibre thermique, on peut définir la luminance de Planck parfois appelée luminance du corps noir qui, pour une fréquence donnée, ne dépend que de la température :

$$L_{\nu,b}(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[ \exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2.17)$$

Si on dérive cette expression par rapport à la longueur d'onde et que l'on cherche pour quelle valeur la dérivée s'annule, on retrouve la loi de Wien. De la même façon, on peut retrouver la loi de Stefan-Boltzmann en multipliant  $L_{\nu,b}$  par  $\pi$  et en procédant cette fois à une intégration sur la longueur d'onde.

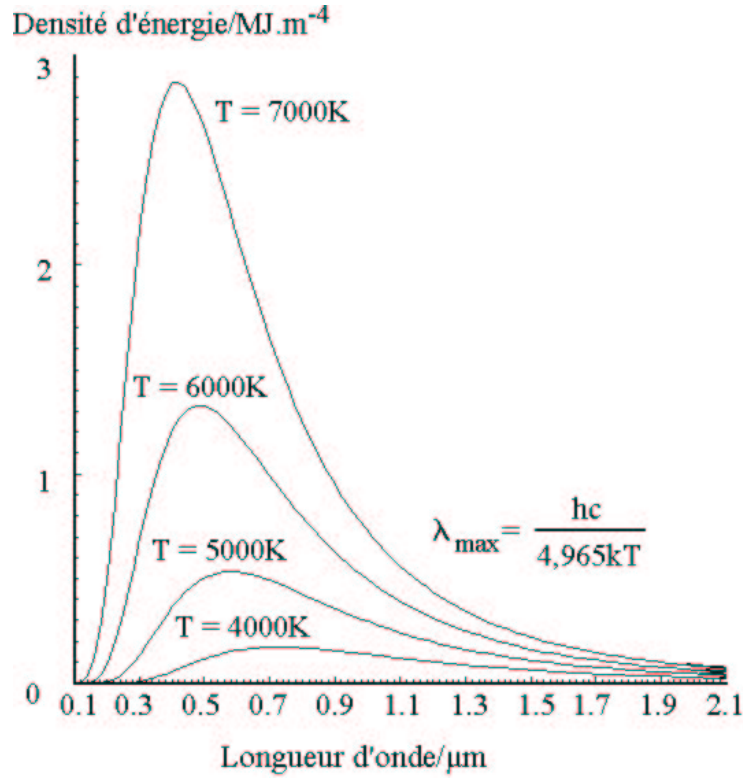


FIG. 2.7 – Courbe du corps noir.

Si, on se place dans un cas monochromatique à la fréquence  $\nu$ , l'émission d'une espèce gazeuse au point  $P$  repéré par le vecteur  $\vec{r}$ , dans la direction  $\vec{u}$  est donnée par  $\kappa_\nu(\vec{r})L_{\nu,b}(\vec{r}, \vec{u})$ . Par conséquent, nous pouvons réécrire dans ce cas le terme source radiatif comme :

$$S_r(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_r(\vec{r}) = \int_{4\pi} \kappa_\nu(\vec{r}) (L_{\nu,b}(\vec{r}, \vec{u}) - L_\nu(\vec{r}, \vec{u})) d\Omega \quad (2.18)$$

D'autre part, si on considère une interface dans le système (surface où nous pouvons définir une normale  $\vec{n}$  en tout point  $\vec{r}$ ), nous pouvons également calculer une densité de flux net en chaque point de cette interface :

$$M(\vec{r}) = \vec{q}_r(\vec{r}) \cdot \vec{n} = \int_{4\pi} L(\vec{r}, \vec{u}) \vec{u} \cdot \vec{n} d\Omega \quad (2.19)$$

La densité de flux  $M$  calculée est appelée émittance, et peut être décomposée en deux parties :  $M(\vec{r}) = M_e(\vec{r}) - M_s(\vec{r})$ , où  $M_e$  est l'émittance entrante, et  $M_s$  est l'émittance sortante. Avant d'énumérer d'autres grandeurs intégrées de la luminance monochromatique parmi les plus utilisées d'entre elles nous souhaitons ajouter quelques mots concernant  $L_\nu$ . En effet, nous en avons donnée une définition qui peut paraître quelque peu abstraite. Elle est en général introduite comme le flux d'énergie rayonné au voisinage d'un point  $P$ , à travers une surface fictive  $dS$ , dans un angle solide  $d\Omega$  autour d'une direction  $\vec{u}$ , et pour l'intervalle de

fréquence  $d\nu$  autour de  $\nu$  (et pendant l'intervalle de temps  $dt$  dans le cas de phénomènes non stationnaires).

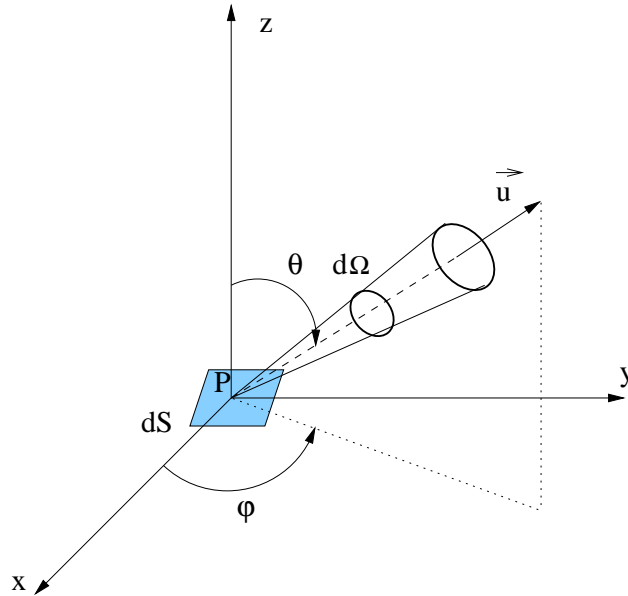


FIG. 2.8 – Définition de la luminance.

Ainsi le flux  $\phi$  passant à travers la surface  $dS$  est relié à la luminance par :

$$d\phi = L_\nu \cos \theta d\nu d\Omega dS \quad \text{ou} \quad \phi = \int_0^\infty d\nu \int_\Omega d\Omega \cos \theta dS \quad (2.20)$$

Les grandeurs énergétiques que nous avons présentées sont celles que nous utiliserons couramment. Nous souhaitons cependant ajouter quelques définitions sur des termes plus couramment employés en synthèse d'images. Il nous a paru important de faire le lien entre celles-ci et celles que nous venons d'établir, car la profusion des termes et la confusion des définitions trouvées ont été pour nous une véritable difficulté dans l'établissement d'un langage commun.

Radiosité : Densité de flux sortante hémisphérique. C'est donc un autre nom pour l'émission sortante que nous avons déjà définie.

Eclairement : Densité de flux entrante (ou émittance entrante).

Radiance : Luminance sortante.

Irradiance : Luminance entrante.

Pour conclure sur ces questions de vocabulaire, le rapport entre la radiance et l'irradiance est nommé BRDF ou réflectance bidirectionnelle, et le rapport de la radiosité sur l'éclairement est appelé réflectance hémisphérique.



## 2.2 Equation de transfert radiatif

Le problème que nous cherchons à résoudre est un problème de transport corpusculaire dans lequel les particules sont des photons véhiculant une énergie  $h\nu$ . Nous allons alors être amenés à suivre un rayon dans une direction  $\vec{u}$ , dans un milieu caractérisé par un coefficient d'absorption  $\kappa_\eta$ , et un coefficient de diffusion  $\sigma_\eta$ . En préambule à l'établissement de l'équation de transfert radiatif, nous souhaitons poser les hypothèses dans lesquelles nous inscrivons notre étude :

- On ne prend pas en compte la polarisation éventuelle du rayonnement
- Les changements d'indice du milieu ne sont pas considérés, et le rayonnement se propage donc en ligne droite (optique géométrique) entre deux réflexions ou diffusions éventuelles
- On admet que localement la matière est dans un état proche d'un état d'équilibre thermodynamique (hypothèse d'équilibre thermodynamique local)
- Le transfert de chaleur par rayonnement se fait de manière quasi-instantanée par comparaison avec les autres moyens de propagation, et on résout donc un problème stationnaire. Ceci ne veut pas dire que nous ne nous intéressons qu'à des problèmes thermiques stationnaires, mais que la dépendance temporelle ne passe que par la dynamique des champs de températures ou de concentrations qui constituent des paramètres d'entrée.

La loi de transport de la fonction  $f_\nu(\vec{r}, \vec{u}, t)$  à l'échelle mésoscopique est l'équation de Boltzmann appliquée à une population de photons. Nous faisons de plus les hypothèses suivantes :

- les photons n'interagissent pas entre eux
- les photons n'interagissent qu'avec des centres absorbeurs et/ou diffuseurs fixes distribués aléatoirement (hypothèse de Lorentz).

La loi de transport utilisée est alors une forme particulière de l'équation de Boltzmann appelée équation de Boltzmann-Lorentz :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial f_\nu}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} f_\nu = C(f_\nu) \quad (2.21)$$

Dans cette équation, le terme de gauche représente le transport pur, alors que le terme de droite  $C(f_\nu)$  est un terme de collision supposé instantané. Le problème de l'établissement de l'équation de transport est donc maintenant ramené au problème de modélisation du terme collisionnel. Dans notre cas, le terme de collision représente les interactions entre les photons et le milieu gazeux (phénomènes d'absorption, d'émission, et de diffusion entrante et sortante). D'autre part, comme nous considérons des problèmes stationnaires le terme dépendant du temps sera nul ; l'équation de Boltzmann-Lorentz devient alors :

$$\vec{u} \cdot \vec{\nabla} f_\nu = C(f_\nu) \quad \rightarrow \quad \frac{\partial f_\nu}{\partial l} = C(f_\nu) \quad (2.22)$$

dans lequel  $l$  est ici l'abscisse curviligne le long du trajet défini par la direction  $\vec{u}$ . Comme il existe une relation simple entre la fonction  $f_\nu$  et la luminance, nous pouvons écrire cette même équation pour la luminance (nous utilisons ici une notation en nombre d'onde  $\eta$  plutôt

qu'en fréquence  $\nu$ ) :

$$\frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} = C(L_\eta(\vec{r}, \vec{u})) \quad (2.23)$$

Pour établir l'équation de transfert radiatif nous cherchons, comme énoncé, à écrire l'évolution spatiale de la luminance étant donnés les phénomènes d'absorption, d'émission, de diffusion entrante et sortante (Fig. 2.9) qui constituent les phénomènes à modéliser dans le terme de collision de l'équation de Boltzmann-Lorentz (Eq. 2.21). Ainsi, l'atténuation de la

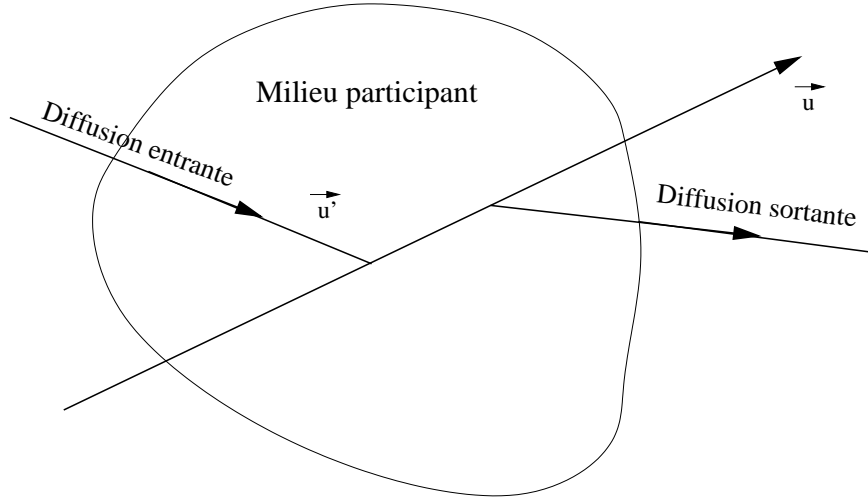


FIG. 2.9 – Propagation d'un rayon lumineux dans un milieu participant.

luminance par absorption seule peut s'écrire :

$$\left. \frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} \right|_{\text{absorption}} = -\kappa_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u}) \quad (2.24)$$

Puisque le système est à l'équilibre thermodynamique local, on peut également écrire le terme source dû à l'émission de la colonne de gaz :

$$\left. \frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} \right|_{\text{émission}} = \kappa_\eta L_{\eta,b}(\vec{r}) \quad (2.25)$$

L'écriture de la partie du rayonnement quittant la direction  $\vec{u}$  par diffusion est similaire à celle précédemment établie pour la perte par absorption :

$$\left. \frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} \right|_{\text{diffusion sortante}} = -\sigma_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u}) \quad (2.26)$$

Par contre, le terme source diffusif est une somme sur toutes les directions, car il faut prendre en compte les rayons lumineux venant de l'ensemble des directions  $\vec{u}'$  et diffusés en  $\vec{r}$  dans la direction  $\vec{u}$  :

$$\left. \frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} \right|_{\text{diffusion entrante}} = \frac{\sigma_\eta}{4\pi} \int_{4\pi} L_\eta(\vec{r}, \vec{u}') \Phi(\eta, \vec{u}, \vec{u}') d\Omega(\vec{u}') \quad (2.27)$$

où  $\Phi(\eta, \vec{u}, \vec{u}')/4\pi$  représente la fonction de phase de diffusion (i.e. la densité de probabilité qu'un photon se propageant dans la direction  $\vec{u}'$  soit diffusé dans la direction  $\vec{u}$ ) et  $d\Omega(\vec{u}')$  représente l'angle solide élémentaire centré autour de  $\vec{u}'$ .

En sommant les quatre contributions du terme collisionnel, on établit l'équation de transfert radiatif (ETR) :

$$\frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} = -\kappa_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u}) + \kappa_\eta L_{\eta,b}(\vec{r}) - \sigma_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u}) + \frac{\sigma_\eta}{4\pi} \int_{4\pi} L_\eta(\vec{r}, \vec{u}') \Phi(\eta, \vec{u}, \vec{u}') d\Omega(\vec{u}') \quad (2.28)$$

Ce n'est là qu'une manière parmi tant d'autres de parvenir à une forme de l'équation de transfert radiatif qui, comme il a été dit précédemment, ne traduit qu'un problème général de transport. Nous l'avons donc établie à partir de l'équation de Boltzmann pour les gaz en considérant les photons comme les particules à traiter et en se plaçant sous l'hypothèse de Lorentz (diffuseurs et absorbeurs fixes et distribués aléatoirement) [Vincenti and Jr., 1965, Sampson, 1965].

Dans un problème où la diffusion peut être négligée, on obtient une forme très simple de l'ETR tenant uniquement compte de l'atténuation d'un rayon le long d'un trajet optique et de l'émission par le gaz traversé :

$$\frac{\partial L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}{\partial l} = \kappa_\eta L_{\eta,b}(\vec{r}) - \kappa_\eta(\vec{r}) L_\eta(\vec{r}, \vec{u}) \quad (2.29)$$

La luminance est écrite en tout point du milieu en ne faisant intervenir que des grandeurs locales. Dans ce cas, on voit que la grandeur fondamentale qui gouverne l'évolution de la luminance, en dehors de la dépendance à la courbe d'émission du rayonnement d'équilibre est le coefficient d'absorption  $\kappa_\eta$ . L'équation (2.29) est écrite sous sa forme différentielle, et peut naturellement se mettre sous une forme intégrale comme nous le verrons dans les chapitres suivants. Mais il apparaît alors plutôt des termes en  $\exp(-\kappa_\eta l)$  qui représentent la transmittivité du gaz.

L'écriture elle-même n'est pas anodine et, outre le fait qu'on considère une écriture en coefficient d'absorption ou en transmittivité, les méthodes de résolution associées ne seront par exemple pas les mêmes pour une formulation intégrale ou une formulation différentielle.

Le passage à l'écriture de l'ETR sous sa forme intégrale en l'absence de diffusion se fait simplement en intégrant l'équation précédente (Eq. 2.29) [Goody, 1989, Modest, 1993] :

$$L_\eta(\vec{r}, \vec{u}) = L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u}) \tau_\eta(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} L_{\eta,b}(\vec{r}') \kappa_\eta(\vec{r}') \tau_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}) d\vec{r}' \quad (2.30)$$

La luminance  $L_\eta(\vec{r}, \vec{u})$  est l'inconnue dans cette équation. Or, on exprime la solution en fonction d'une autre inconnue, qui peut elle-même s'exprimer sous la forme de l'équation 2.30. En particulier, si  $\vec{r}_0$  se trouve sur une paroi,  $L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u})$  est la somme de la luminance émise et de la luminance réfléchie en  $\vec{r}_0$ . Le seul cas pour lequel on connaît  $L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u})$  est celui où le système est délimité par des parois noires, car alors  $L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u}) = L_{\eta,b}(\vec{r}_0)$ . Quoi qu'il en

soit, et la luminance dépendant de 6 variables (3 coordonnées pour la position, deux pour la direction, et une variable pour la dimension spectrale), cette équation est d'une grande complexité à résoudre, en particulier à cause du caractère fortement variable des spectres de raies des gaz dans le domaine infrarouge avec les conditions extérieures. Il apparaît donc ici déjà important de choisir une méthode de résolution de l'ETR pour laquelle le caractère multidimensionnel du problème ne soit pas un obstacle, notamment du point de vue des temps de calcul.

## 2.3 Modèles spectraux représentant le rayonnement des gaz

Dans notre contexte, la majeure difficulté de modélisation du transfert radiatif concerne les propriétés spectrales du rayonnement des gaz. En effet, les molécules de gaz offrent un spectre complexe de raies d'émission et d'absorption, dont l'intensité et la forme pour différentes longueurs d'onde sont fonctions des paramètres macroscopiques que sont la pression et la température du système. La représentation de ce spectre dans l'infra-rouge nécessite donc un travail en amont de simulation et d'archivage des comportements et des formes des raies des différents gaz selon les conditions extérieures. L'étape suivante est l'utilisation de ces données dans les modèles de transferts radiatifs. Il existe différentes sortes de modèles qui décrivent le comportement spectral des gaz, choisissant parfois de conserver la complexité initiale du spectre au détriment du temps de calcul des codes numériques les utilisant, et parfois d'utiliser des modèles simplifiés pour accélérer l'obtention de la solution numérique, mais au détriment de sa précision. Comme souvent, on ne peut pas dire qu'un modèle est meilleur qu'un autre, en dehors du contexte particulier dans lequel il est utilisé, et parfois de la spécificité même du problème auquel on l'applique.

Nous allons commencer par présenter le modèle raie par raie, qui constitue la description spectrale la plus détaillée que nous pouvons utiliser. Les autres modèles spectraux, plus simples à manipuler, que nous décrirons ensuite dérivent des données du modèle raie par raie.

### 2.3.1 Modèle raie par raie

Ce modèle spectral utilise des banques de données provenant soit de déterminations expérimentales, soit de spectres synthétiques créés à partir de la connaissance des niveaux d'énergie des molécules des gaz impliqués. Chaque raie est définie par la position de son centre  $\nu_i$ , son intensité  $S_i(T_0)$ <sup>6</sup> (avec  $T_0 = 296K$ , température de référence), l'énergie totale du niveau bas de la transition  $i$  (permettant de passer de l'expression de  $S_i(T_0)$  à  $S_i(T)$ , intensité de la raie à une température quelconque), et le profil de la raie  $F_i(\nu - \nu_i)$ . L'inconvénient majeur du modèle raie par raie vient du fait qu'il faut sommer un grand nombre de

---

<sup>6</sup>L'intensité d'une raie dépend du peuplement des niveaux d'énergie entre lesquels se produit la transition. Or ce peuplement est uniquement fonction de la température, suivant la statistique de Boltzmann à l'équilibre thermodynamique local.

raies pour calculer les propriétés radiatives d’une colonne de gaz.

Supposons que l’on veuille calculer un coefficient d’absorption  $\kappa_\nu$  à l’aide de ce modèle. Alors, nous devons sommer la contribution de chacune des raies présentes dans l’intervalle de fréquence considéré, pour chacune des espèces présentes dans le gaz :

$$\kappa_\nu = \sum_{\text{espèces}} \sum_i S_i F(\nu - \nu_i) \quad (2.31)$$

On estime ainsi, qu’il faut prendre en compte à peu près  $10^6$  raies [Taine and Soufiani, 1999], avec leur profil, dans ce type d’approche. De plus, de telles représentations de spectre seront gardées sous une forme échantillonnée qui conduira à une contrainte élevée de stockage en mémoire. Elles permettent d’avoir accès à tous les détails des spectres, mais leur emploi est donc doublement coûteux : pour leur production d’abord, et leur stockage ensuite. Pour cette raison, cette représentation spectrale est surtout appliquée comme modèle de référence pour valider les résultats obtenus à partir de modèles dégradés. La construction de modèles dégradés reste un projet ambitieux car il demande de représenter au mieux les propriétés radiatives d’un spectre, sans en conserver toute la complexité. Le terme employé dans la phrase précédente : “au mieux” reste volontairement assez flou, dans la mesure où c’est à chaque utilisateur d’un modèle de définir la précision qu’il veut obtenir par rapport à un modèle de référence, dans les configurations choisies.

## 2.3.2 Modèles simplifiés

Pour obtenir des modèles spectraux plus synthétiques et moins lourds en terme de volume de données, on se place à un niveau spectral plus grossier. On va dans ce cas considérer des intervalles spectraux plus larges, pour lesquels un ensemble de propriétés radiatives moyennes sera représenté à l’aide d’un nombre réduit de paramètres. Nous allons maintenant présenter les plus communs de ces modèles approchés en commençant par les modèles globaux, ainsi nommés car ils représentent tout le comportement spectral par des coefficients d’absorption globaux. Nous exposerons ensuite les modèles de bandes en nous concentrant sur les modèles à bandes étroites qui sont maintenant largement utilisés et qui ont prouvé leur efficacité dans une large gamme de configurations à pression atmosphérique.

### 2.3.2.1 Modèles globaux

Comme nous venons de le dire, la démarche est ici de représenter tout le comportement spectral du rayonnement d’un gaz par un seul coefficient d’absorption ou d’émission. On comprend aisément les restrictions imposées par le choix d’un modèle de ce genre en termes de précision du calcul. En effet, suivant les situations de transfert auxquelles on s’intéresse, les longueurs d’onde importantes ne sont pas du tout les mêmes, et par conséquent l’utilisation dans tous les cas d’un coefficient d’absorption unique ne peut être satisfaisant. Ainsi, dans les applications atmosphériques, on peut être amené à s’intéresser au rayonnement transmis sur des distances de plusieurs kilomètres où presque seules les ailes de raies participent à l’échange, alors qu’en combustion par exemple où les distances sont beaucoup plus courtes,

l'essentiel de l'échange se fait au centres de raies.

Dans la pratique, ces modèles peuvent donner de bons résultats dans certaines configurations, et en particulier quand les produits de combustion comportent une grande part de suie, qui a tendance à masquer le caractère complexe des spectres de raies des gaz (précisément donc quand un modèle spectral de rayonnement des gaz n'est pas nécessaire). De même, ils peuvent se révéler valides pour estimer le transfert radiatif au sein de turbines d'avion (turbines à gaz), où la forte pression conduit à un élargissement des raies spectrales, qui se recouvrent alors fortement ; cela conduit à une uniformisation des propriétés sur le spectre. Ces modèles sont désignés de manière générique dans la littérature sous l'acronyme SGG (Simple Grey Gas model, ou modèle de gaz gris).

Le modèle WSGG (Weighted Sum of Grey Gases, ou somme de gaz gris) [Hottel and Sarofim, 1967], a été imaginé pour tenter de résoudre les problèmes du modèle de gaz gris tout en gardant sa simplicité. Il est basé sur l'utilisation de plusieurs gaz gris auxquels on ajoute en général un gaz clair pour rendre compte de l'existence de fenêtres spectrales. Par ce biais, on identifie plusieurs comportements possibles pour l'atténuation ou l'émission du rayonnement par une colonne de gaz. Les paramètres intervenant dans ce modèle sont donc le nombre de gaz gris, les émissivités choisies pour ces gaz gris, ainsi que les coefficients de pondérations associés

L'utilisation des modèles SGG et WSGG a été comparée par Liu et al. [Liu et al., 1998] pour deux configurations contenant un mélange gazeux  $H_2O-CO_2$  à pression atmosphérique, ainsi que pour un brûleur de gaz naturel. Les auteurs soulignent la difficulté de déterminer le coefficient d'absorption utilisé dans le modèle SGG, ainsi que le gain en précision relatif à l'utilisation du modèle WSGG.

En raison de sa grande simplicité, le modèle WSGG a été abondamment étudié et appliqué pour diverses configurations [Modest, 1991, Smith et al., 1982]. Par la suite, de notables améliorations ont été apportées à ce modèle [Denison and Webb, 1993, Taine and Soufiani, 1999] à la fois en termes de simplicité de mise en œuvre, de rapidité de calcul, et de précision du résultat. Cependant, il reste de gros problèmes pour les mélanges de gaz non homogènes<sup>7</sup> qui demandent le re-calcul systématique des coefficients de pondération en chaque point.

Les modèles de bandes représentent une alternative aux modèles globaux pour rendre compte des propriétés radiatives variables des gaz suivant la région spectrale considérée. Dans ces modèles de bandes, on regroupe les raies d'une même région spectrale. Le spectre utile est ainsi découpé en bandes de largeurs variables suivant le modèle que l'on considère, mais qui peuvent typiquement aller de quelques  $cm^{-1}$  à plusieurs centaines de  $cm^{-1}$ .

Nous pouvons mentionner le modèle à bandes larges (modèle d'Edwards et Ménard, 1964), où une bande a une largeur suffisante pour regrouper un grand nombre de transitions

---

<sup>7</sup>On utilisera par la suite par le terme de "non homogène" pour désigner les situations dans lesquelles les propriétés radiatives dépendent de la position dans le milieu.

vibrationnelles. Toutefois, ce type de modèles de bandes n'est pas le plus répandu et nous n'en dirons pas plus à ce sujet. Nous allons maintenant nous concentrer sur la description des modèles à bandes étroites, qui sont largement utilisés pour leur efficacité.

### 2.3.2.2 Modèles de bandes étroites en transmittivité moyenne

Le modèle statistique à bandes étroites repose sur le découpage du spectre utile en régions sur lesquelles on fait des hypothèses sur la distribution des raies, leur forme, ainsi que leur intensité. La bande est étroite au sens où l'évolution de la courbe de Planck dans la bande est négligée. La luminance d'équilibre sera donc considérée comme constante sur l'étendue de la bande et égale à la luminance au centre de la bande ou aux bornes suivant les conventions qu'on se fixe. Le nombre de paramètres caractérisant une bande étroite est réduit (typiquement deux décrivant un coefficient d'absorption moyen et un chevauchement de raies). Le but de ces modèles est de permettre de calculer la transmittivité moyenne  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$  d'une colonne homogène de gaz de longueur  $l$  sur la bande étroite de largeur  $\Delta\nu$  :

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp(-\kappa_\nu l) d\nu \quad (2.32)$$

On a donc une grandeur radiative intégrée sur la bande étroite et on a perdu l'information fréquentielle détaillée par rapport au modèle raie par raie. Les modèles à bandes étroites se distinguent par les hypothèses qui sont faites sur la distribution et l'intensité des raies dans chaque bande.

Le modèle d'Elsasser considère que les raies sont équidistantes sur une bande étroite avec une intensité égale, un même profil de raie de largeur à mi-hauteur  $\bar{\gamma}$ . Il utilise alors seulement deux autres paramètres pour décrire chaque bande : le nombre de raies  $N$ , et leur intensité  $S$ . Cependant, d'après la physique d'émission du rayonnement des gaz, ce modèle s'avère peu réaliste car les raies sont d'intensité et d'espacement très différents dans la réalité. On est donc amené à considérer un ensemble de raies dont la position est aléatoire, et pour chacune indépendante des autres. Ces modèles statistiques à bandes étroites sont basés sur une série d'hypothèses concernant les  $N$  raies sur chaque bande de largeur  $\Delta\nu$  et d'espacement moyen  $\delta = \frac{\Delta\nu}{N}$  :

1. La bande spectrale de largeur  $\Delta\nu$  contient un grand nombre de raies  $N$
2. Les positions des centres de raies, ainsi que leur intensité sont supposées statistiquement indépendantes
3. Les intensités de raies suivent une loi probabiliste  $P(S)$
4. Les  $N$  raies ont la même demi-largeur à mi-hauteur  $\bar{\gamma}$

Le paramètre gouvernant le comportement de cet ensemble de raies est la loi de répartition des intensités  $P(S)$ . A partir de ces hypothèses de base, plusieurs lois ont été proposées pour la répartition des intensités de raies sur les bandes étroites :

- loi uniforme : toutes les intensités de raies sont identiques
- loi exponentielle (Goody, 1952)

$$P(S) = \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{S}{\sigma}\right)$$

- loi de Godson (1954)

$$P(S) = \frac{\sigma}{SS_m}, \quad S < S_m$$

$$P(S) = 0, \quad S \geq S_m$$

- loi inverse exponentielle de Malkmus (1967)

$$P(S) = \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{S}{\sigma}\right)$$

Pour ces quatre lois  $\sigma$  représente l'intensité moyenne des raies (à ne pas confondre ici avec la constante de Stefan-Boltzmann) :

$$\int_0^\infty P(S) S dS = \sigma$$

Les deux dernières lois n'étant pas sommables, il faut les modifier en introduisant l'intensité maximale des  $N$  raies  $S_m$  et le rapport  $R$  entre respectivement, l'intensité maximale et minimale pour aboutir à :

- la loi inverse tronquée de Godson

$$P(S) = 0, \quad 0 \leq S \leq S_m/R$$

$$P(S) = \frac{1}{S \ln(R)}, \quad S_m/R \leq S \leq S_m$$

$$P(S) = 0, \quad S_m \leq S$$

- la loi inverse exponentielle tronquée de Malkmus

$$P(S) = \frac{1}{S \ln(R)} \left[ \exp\left(-\frac{S}{S_m}\right) - \exp\left(-R \frac{S}{S_m}\right) \right]$$

Ces distributions de raies permettent d'exprimer une transmittivité moyenne  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$  dans une bande étroite pour une colonne de gaz homogène de longueur  $l$ . On exige de plus que les expressions obtenues soient exactes pour les limites d'absorption faible et forte. L'utilisation d'une distribution inverse-exponentielle de Malkmus aboutit alors à une expression relativement simple (Eq. 2.33) <sup>8</sup> :

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \exp\left[-\frac{\phi}{\pi} \left(\sqrt{1 + \frac{2\pi x p l \bar{k}}{\phi}} - 1\right)\right] \quad (2.33)$$

où  $x$  est la fraction molaire du gaz considéré, et  $p$  est la pression totale. L'expression de la transmittivité moyenne ne dépend alors que de deux paramètres :

$$\phi = 2\pi \frac{\bar{\gamma}}{\delta} \quad (2.34)$$

---

<sup>8</sup>Dans la mesure où nous choisirons cette distribution par la suite, nous ne donnons pas ici les expressions obtenues pour les autres distributions données pour exemples.



qui est un paramètre de forme décrivant le chevauchement des raies au moyen de leur demi-largeur à mi-hauteur  $\bar{\gamma}$  et de leur espacement moyen  $\delta$ , et :

$$\bar{k} = \frac{1}{\delta N} \sum_{i=1}^N S_i = \frac{\bar{S}}{\delta} \quad (2.35)$$

qui représente un coefficient moyen d'absorption par unité de pression partielle de gaz absorbant ( $kxpl = \kappa l \leftrightarrow \bar{k}xpl = \bar{\kappa}l$ ).

Pour une faible valeur de  $\phi$ , les raies ne se chevauchent quasiment pas, alors que pour les grandes valeurs, elles se recouvrent fortement et les variations du spectre tendent à disparaître pour donner des propriétés radiatives indépendantes de la fréquence sur la bande étroite, et donc tendre vers le comportement d'un gaz gris. Comme le recouvrement des raies sur un intervalle de fréquence  $\Delta\nu$  est plus fort pour un  $\phi$  élevé, la transmittivité d'une couche de gaz de dimension fixée va diminuer quand  $\phi$  augmente (Fig. 2.10). A l'inverse, à la limite où le paramètre de forme est très petit, on tend vers une situation où les raies sont complètement séparées dans la bande de largeur  $\Delta\nu$ .

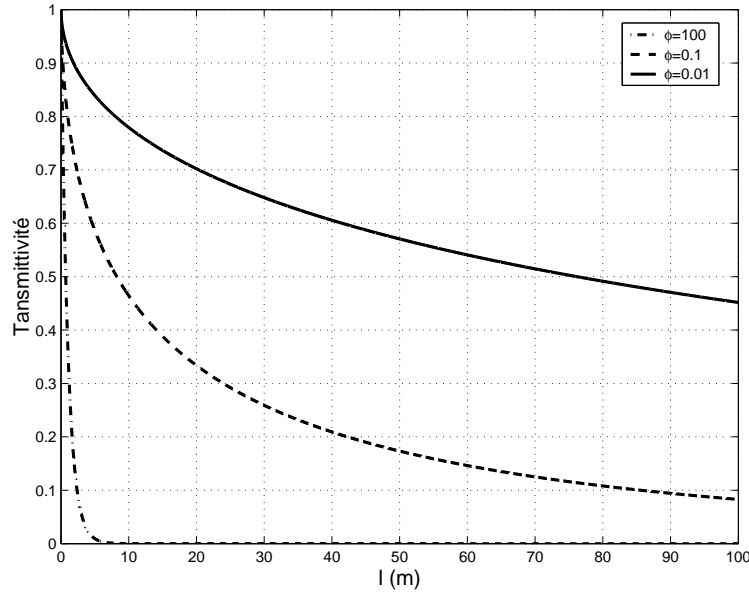


FIG. 2.10 – Rôle du paramètre de forme dans la transmittivité moyenne.

Dans un cas optiquement mince (courtes distances, i.e.  $l$  petit), le terme d'atténuation exponentiel peut se développer au premier ordre pour toutes les valeurs de  $\kappa$  :

$$\exp[-\kappa l] \approx 1 - \kappa l$$

Dans ce cas, l'atténuation moyenne sur la distance  $l$  est simplement  $(1 - \bar{\kappa}l)$  ; elle s'exprime par un coefficient d'absorption moyen comme dans le cas d'un modèle de gaz gris.

### 2.3.3 Modèle de bandes étroites en k-distribution

Les modèles de bandes étroites décrits au paragraphe précédent permettent de calculer la transmittivité moyenne d'une colonne de gaz homogène, et l'on a vu que pour la distribution inverse-exponentielle, chaque bande étroite est seulement caractérisée par deux paramètres. Nous verrons plus tard comment le transfert radiatif peut s'écrire en fonction de cette seule transmittivité moyenne  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$ .

Cependant, toujours sous l'hypothèse de bandes étroites et dans le cas simplifié de propriétés radiatives homogènes, on préfère souvent une écriture en distribution de coefficients d'absorption  $\kappa$  à une écriture en transmittivité moyenne. Cela signifie que, au lieu de passer de l'information fréquentielle contenue dans  $\kappa_\nu$  à une information moyenne exprimée par  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$ , on préfère transformer l'information  $\kappa_\nu$  en information sur la distribution statistique de  $\kappa$  dans la bande : on peut alors rester avec des écritures monochromatiques, mais on a perdu la correspondance stricte entre le coefficient d'absorption et les fréquences. La raison pour laquelle ce passage de  $\kappa_\nu$  à une représentation statistique de  $\kappa$  a du sens, est que la fréquence  $\nu$  n'intervient dans le transfert radiatif qu'à travers  $\kappa_\nu$  et  $L_{\nu,b}$ . Or, sous l'hypothèse de bandes étroites,  $L_{\nu,b}$  est une constante et donc à deux fréquences différentes  $\nu_1$  et  $\nu_2$  telles que  $\kappa_{\nu_1} = \kappa_{\nu_2}$  dans la même bande, on retrouve le même problème de transfert radiatif. On peut donc perdre l'information sur  $\nu$  et ne retenir que la fréquence de rencontre de  $\kappa$ .

Si on pose  $f(\kappa)d\kappa$  comme la fraction de la bande étroite de largeur  $\Delta\nu$  pour laquelle le coefficient d'absorption  $\kappa_\nu$  prend des valeurs comprises entre  $\kappa$  et  $\kappa + d\kappa$  ( $f(\kappa)$  densité de probabilité de  $\kappa$ ) (Fig. 2.11), alors la transmittivité moyenne d'une colonne de longueur  $l$  s'écrit :

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp(-\kappa_\nu l) d\nu = \int_0^\infty f(\kappa) \exp(-\kappa l) d\kappa \quad (2.36)$$

Il en va de même pour toutes les grandeurs radiatives moyennes sur  $\Delta\nu$  qui peuvent s'écrire de façon statistique sous cette forme :

$$\bar{G}_{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} G(\kappa_\nu) d\nu = \int_0^\infty f(\kappa) G(\kappa) d\kappa \quad (2.37)$$

La connaissance de  $f(\kappa)$  (de même que la connaissance de la fonction  $\bar{\tau}(l)$ ) nous permet donc de poser l'intégralité des problèmes de transfert radiatif sur la bande étroite sous la forme d'une intégrale dans l'espace des  $\kappa$  <sup>9</sup>.

Remarque : On peut voir la formulation en k-distributions comme un cas particulier du modèle de somme pondérée de gaz gris à la limite d'un nombre  $N$  de gaz gris tendant vers l'infini. En effet dans un modèle de somme pondérée de gaz gris  $f(\kappa) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \delta(\kappa - \kappa_i)$ . Et ainsi :

---

<sup>9</sup>On verra que ceci n'est plus vrai si le milieu est inhomogène, car pour un couple  $(P, Q)$  de points,  $\kappa_{\nu_1}(P) = \kappa_{\nu_2}(P) \nRightarrow \kappa_{\nu_1}(Q) = \kappa_{\nu_2}(Q)$ . La déformation du spectre entre deux points n'est à priori pas la même pour deux fréquences distinctes

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \int_0^\infty f(\kappa) \exp(-\kappa l) d\kappa = \int_0^\infty \sum_{i=1}^N \alpha_i \delta(\kappa - \kappa_i) \exp(-\kappa l) d\kappa$$

L'utilisation des modèles à bandes étroites associée à une distribution statistique des coefficients d'absorption a été proposée par Domoto en 1974 [Domoto, 1974]. La fonction de distribution associée  $f(\kappa)$  (Fig. 2.12) peut être obtenue en divisant la bande étroite en intervalles sur lesquels  $\kappa_\nu$  est monotone. Sur chaque intervalle on a ainsi une expression simple de  $f(\kappa)$  et la fonction de distribution totale est donnée par une sommation sur tous les  $N$  intervalles spectraux définis :

$$f(\kappa) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\Delta\nu} \left| \frac{d\nu}{d\kappa_\nu} \right|_i [H(\kappa - \kappa_{min,i}) - H(\kappa - \kappa_{max,i})] \quad (2.38)$$

où  $H$  est la fonction de Heaviside,  $\kappa_{min}$  et  $\kappa_{max}$  respectivement la valeur minimale et maximale de  $\kappa_\nu$  dans un intervalle  $i$  où son évolution est monotone.

Il existe une autre manière de construire la fonction  $f(\kappa)$  en remarquant que l'équation 2.36 montre que  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$  est la transformée de Laplace de  $f(\kappa)$  :

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \mathcal{L}(f(\kappa)) \quad (2.39)$$

On peut donc aussi obtenir une relation mathématique simple entre la fonction de répartition  $f(\kappa)$  et la transmittivité moyenne :

$$f(\kappa) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)) \quad (2.40)$$

Notre capacité à établir une expression de  $f(\kappa)$  dépend par ce moyen de la forme obtenue pour la transmittivité moyenne. Si on est capable d'en calculer la transformée inverse de Laplace, alors on sait produire  $f(\kappa)$ .

### 2.3.4 Mise en œuvre des modèles de bandes dans les milieux hétérogènes

Dans les deux paragraphes précédents, les hypothèses de départ sont les hypothèses de bandes étroites (invariance de la luminance de Planck dans la bande) et les hypothèses de propriétés radiatives homogènes dans le milieu. Ici nous gardons les hypothèses de bandes étroites et nous discutons des options proposées pour lever la contrainte d'homogénéité.

Dans le cas inhomogène, l'équation 2.37 montre qu'on peut exprimer une grandeur moyennée sur le domaine spectral en utilisant la formulation en k-distribution. En particulier, on peut appliquer cela à l'expression de la transmittivité moyenne ( $G \equiv \tau$ ) :

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \tau_\nu(l) d\nu = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\left(\int_0^l -\kappa_\nu(x) dx\right) d\nu \quad (2.41)$$

Et la connaissance de la transmittivité moyenne sur une bande étroite nous permet de formuler entièrement le problème du transfert radiatif. Si le milieu est homogène, alors  $\kappa_\nu$  ne

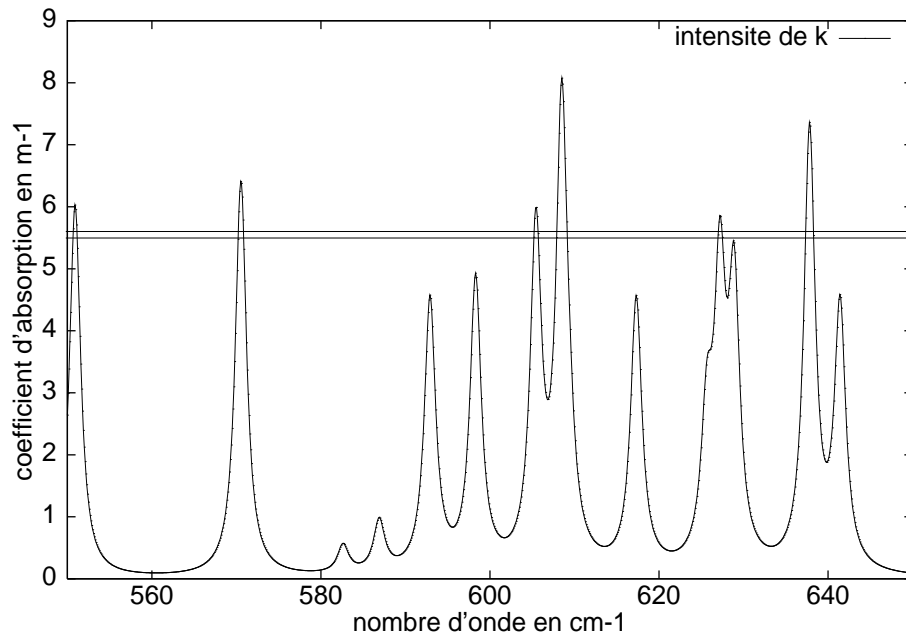


FIG. 2.11 – Spectre synthétique d'absorption. On construit la fonction de distribution des coefficients d'absorption  $f(\kappa)$  d'après la fréquence d'occurrence de  $\kappa$  sur une bande étroite.

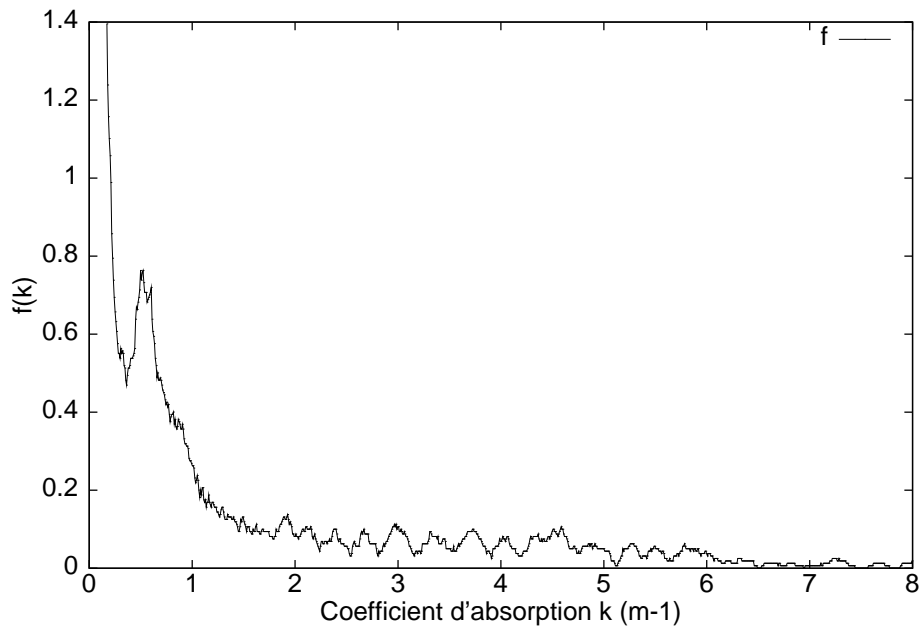


FIG. 2.12 – Fonction de Domoto. Le coefficient d'absorption est réorganisé sur une bande étroite

dépend pas de la position  $x$  et on retrouve bien l'expression de  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$ . Le calcul de  $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(l)$  sur une colonne de longueur  $l$  demande de connaître la valeur du coefficient d'absorption pour tout point  $x$  du trajet optique. Le coefficient d'absorption n'est plus seulement dépendant de la fréquence ( $\kappa \neq \kappa_\nu$ ), mais dépend aussi de la position ( $\kappa = \kappa_\nu(x)$ ). Comme le coefficient d'absorption est maintenant une fonction à deux variables, il n'existe plus sur le chemin optique une seule distribution  $f(\kappa)$ , mais une infinité de distributions indépendantes pour chaque point du chemin. Les formulations présentées jusqu'ici ne sont donc pas applicables pour un milieu inhomogène. Cependant, on continue à les utiliser sous certaines hypothèses simplificatrices. Le bien fondé de leur emploi est ensuite validé de manière empirique dans certaines plages de conditions physiques.

Ainsi, Pour contourner la difficulté, il existe deux méthodes principales : la méthode de Curtis-Godson, et la méthode des coefficients d'absorption corrélés (correlated-k ou ck).

Dans la méthode de Curtis-Godson, on substitue la transmittivité moyenne d'une colonne de gaz hétérogène par celle d'une colonne homogène équivalente. On écrit alors les coefficients de bande équivalents  $\bar{\kappa}_{CG}$  et  $\bar{\phi}_{CG}$  pour la pseudo-colonne homogène :

$$\begin{aligned}\bar{\kappa}_{CG} &= \frac{\int_0^l \bar{\kappa}(s) ds}{\int_0^l ds} \\ \bar{\phi}_{CG} &= \frac{\int_0^l \phi \bar{\kappa} ds}{\int_0^l \bar{\kappa} ds}\end{aligned}$$

La méthode des k-corrélés adopte une approche différente, et fait l'hypothèse de transformations homothétiques du spectre sur une bande étroite : les raies se déforment de la même manière sur l'ensemble de la bande, en fonction de la température, des concentrations et de la pression le long du trajet optique (Fig. 2.13). C'est cette méthode qui sera utilisée dans nos applications pour traiter les milieux inhomogènes.

## Hypothèse sous-jacente à l'utilisation de la méthode ck

L'équation 2.41 peut se réécrire en fonction du coefficient d'absorption moyen dans une bande étroite  $\bar{\kappa} = \langle \kappa \rangle = \int_0^\infty \kappa f(\kappa) d\kappa$ , en introduisant un coefficient d'absorption normalisé  $a_\nu(\bar{\kappa}, \phi) = \frac{\kappa_\nu}{\bar{\kappa}}$ <sup>10</sup> :

$$\bar{\tau}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\left(\int_0^l -\bar{\kappa}(x) a_\nu(x; \bar{\kappa}, \phi) dx\right) d\nu \quad (2.42)$$

Dans un cas homogène,  $a_\nu$  est indépendant de  $x$  ; on peut donc le sortir de l'intégrale sur la position (Eq. 2.43) :

$$\bar{\tau}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\left(-a_\nu(\bar{\kappa}, \phi) \underbrace{\int_0^l \bar{\kappa}(x) dx}_u\right) d\nu \quad (2.43)$$

<sup>10</sup>Nous omettons désormais l'indice  $\Delta\nu$  dans la notation des quantités moyenne sur une bande.

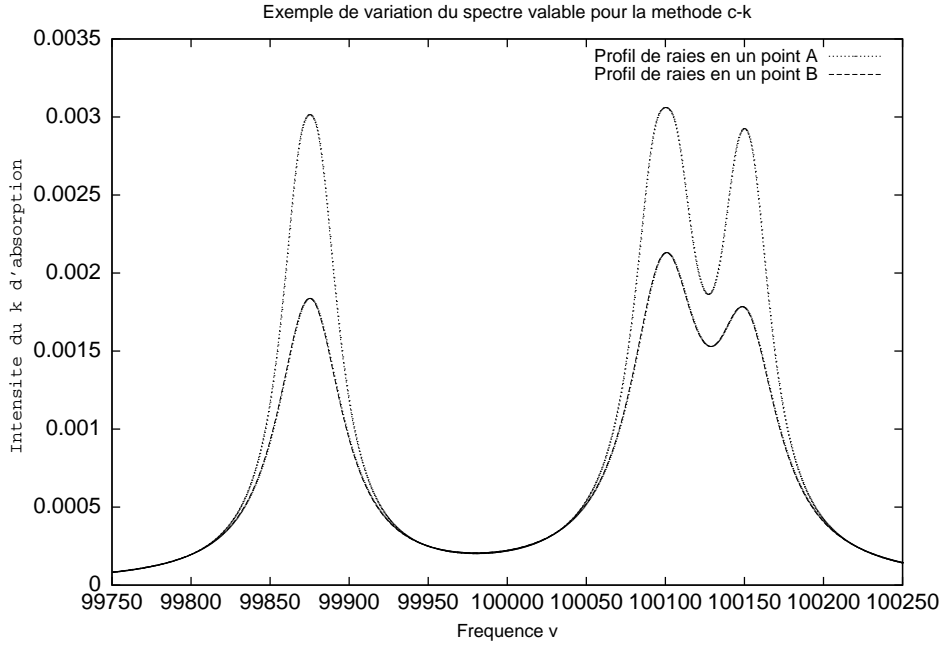


FIG. 2.13 – Validité de la méthode ck. Les raies évoluent de manière simultanée et identique en fonctions des paramètres extérieurs.

Cette opération mathématique correcte pour des cas homogènes continue à être appliquée pour des cas inhomogènes, ce qui constitue une hypothèse forte de la méthode ck. Cette hypothèse signifie que le rapport  $\kappa/\bar{\kappa}$  reste inchangé quelle que soit la position  $x$  sur le trajet optique. Autrement dit, pour deux positions différentes, la forme du spectre ne change pas, et la seule chose qui varie est la valeur moyenne du coefficient d'absorption (Fig 2.13). Ce qui signifie que toutes les raies dans une bande étroite donnée évoluent de la même façon le long d'un trajet optique. Cette hypothèse est validée a posteriori sur des cas concrets d'application mais n'a, encore une fois, aucune justification physique.

A partir de là, on peut choisir une écriture statistique de la transmittivité moyenne en fonction de  $a$ , c'est à dire en k-distribution normalisée :

$$\bar{\tau}(l) = \int_0^\infty \exp(-au) f(a) da \quad (2.44)$$

On introduit ensuite la fonction de répartition notée  $g(\kappa)$ , continuellement croissante sur son intervalle de définition  $[0, 1]$  (Fig. 2.14) :

$$g(\kappa) = \int_0^\kappa f(\kappa') d\kappa' \quad (2.45)$$

Cette fonction de répartition représente la probabilité pour que le coefficient d'absorption

ait une valeur inférieure à  $\kappa$  dans la bande de largeur  $\Delta\nu$ . Et l'équation 2.37 se réécrit :

$$\overline{G} = \int_0^\infty f(\kappa)G(\kappa)d\kappa = \int_0^1 G(\kappa(g))dg \quad (2.46)$$

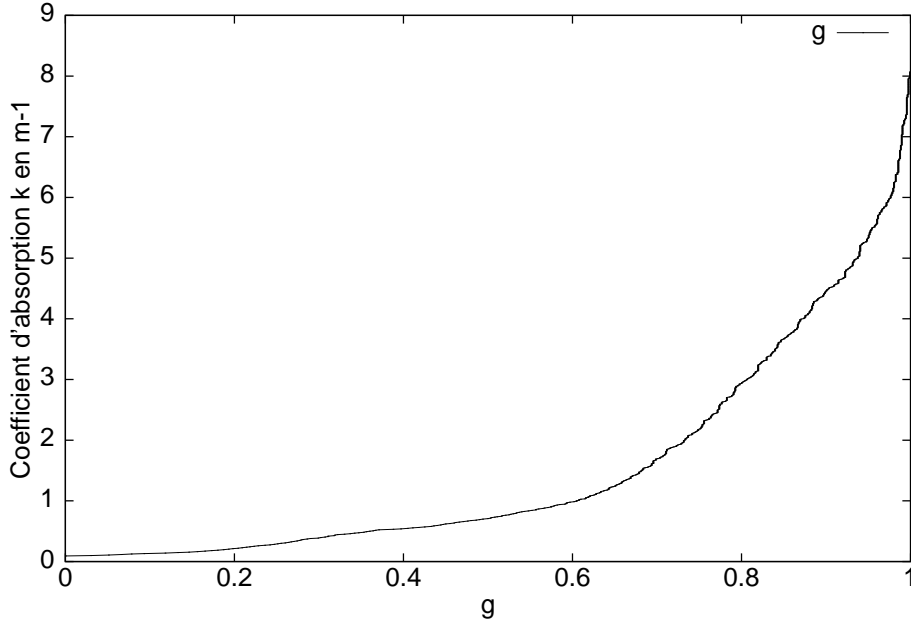


FIG. 2.14 – fonction de répartition de  $\kappa$ .

On peut ainsi donner une expression statistique de  $\overline{\tau}(l)$  analogue à celle d'une colonne homogène :

$$\overline{\tau}(l) = \int_0^1 \exp(-a(g; \overline{\kappa}, \phi)u) dg \quad (2.47)$$

La fonction inverse de la cumulative  $\kappa(g)$  représente le coefficient d'absorption réordonné de façon croissante. Dans le cadre de l'approximation ck, on considère que la valeur de la fonction de répartition  $g(\kappa)$  est conservée le long du trajet optique, même dans le cas d'une colonne de gaz inhomogène ; cette hypothèse permet de calculer la valeur du coefficient d'absorption en tout point du milieu à partir du coefficient d'absorption du point d'émission.

## 2.4 Propriétés spectrales de la suie

La détermination des propriétés optiques de la suie est un problème complexe, car il faudrait connaître la distribution de taille et la forme des particules de suie ou des agrégats qui peuvent se former lors de réactions de combustion. La suie joue un rôle important car elle rend la flamme plus lumineuse et permet par rayonnement un refroidissement des zones de réactivité chimique. On considère généralement pour les applications en combustion que

les particules de suie ne sont pas agglomérées et les propriétés optiques de la suie peuvent être déterminées en utilisant la théorie de Mie à la limite de Rayleigh (particules de faible diamètre) [Modest, 1993] :

$$\kappa_\eta = \frac{36\pi n\chi}{(n^2 - \chi^2 + 2)^2 + 4n^2\chi^2} f_v \eta$$

où  $n$  et  $\chi$  sont respectivement les parties réelles et imaginaires de l'indice de réfraction complexe de la suie, et  $f_v$  la fraction volumique de suie. Une approximation simple a été proposée par Hottel [Hottel and Sarofim, 1967] :

$$\kappa_\eta = \alpha f_v \eta$$

où  $\alpha$  est une constante.

Nous utilisons cette corrélation simple faisant intervenir la fraction volumique de suie et le nombre d'onde  $\eta$  au centre d'une bande étroite. Aux plages de fréquences où nous nous trouvons, il est en effet raisonnable de négliger la variation de  $\kappa_\eta$  sur une bande étroite pour la suie. De plus nous utilisons une valeur de la constante  $\alpha$  ( $\alpha = 5.5$ ), qui a été déterminée pour la combustion de flammes de méthane [Dalzell and Sarofim, 1969, Lee and Tien, 1981] :

$$\kappa_{\eta, \text{suie}} = \eta f_v \times 5.5 \quad (2.48)$$

Cette corrélation a été utilisée en particulier par Zhang et al. [Zhang et al., 1988].

On peut ajouter que pour des applications de combustion usuelles, les fractions volumiques de suie sont en général comprises entre  $10^{-8}$  et  $10^{-5}$  [Solovjov and Webb, 2001]. Par ailleurs, nous considérons que les particules de suie sont petites (de diamètre  $\approx 10nm$ ), de telle sorte que l'on puisse négliger leur effet diffusif sur le rayonnement. Cette approximation reste questionnée par certains auteurs, en particulier en présence d'aggrégats de suie de grande taille [Eymet et al., 2002].

### 2.4.1 Corrélations spectrales

L'équation 2.29 fait apparaître des produits entre le coefficient d'absorption et la luminance d'une part, la luminance noire d'autre part. Dans le cas d'une prise de moyenne spectrale (exemple : écriture moyenne sur une bande étroite), le produit  $\overline{\kappa_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}$  n'est pas séparable, car la luminance en un point est liée aux propriétés radiatives du milieu. Par contre, le produit  $\overline{\kappa_\eta L_{\eta,b}(\vec{r})}$  peut être séparé sous l'hypothèse de bandes étroite (luminance noire constante sur la bande) :

$$\frac{\partial \overline{L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}}{\partial l} = -\overline{\kappa_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u})} + \overline{\kappa_\eta L_{\eta,b}(\vec{r})} \quad \text{et} \quad \overline{\kappa_\eta L_{\eta,b}(\vec{r})} = \overline{\kappa_\eta} \overline{L_{\eta,b}(\vec{r})} \quad (2.49)$$

Mais

$$\overline{\kappa_\eta L_\eta(\vec{r}, \vec{u})} \neq \overline{\kappa_\eta} \overline{L_\eta(\vec{r}, \vec{u})}$$



On ne peut donc établir une ETR moyenne sur une bande spectrale à moins de faire une hypothèse de décorrélation qui n'a à priori aucune raison de se justifier, le coefficient d'absorption  $\kappa_\nu$  et la luminance  $L_\nu$  étant tous deux dépendants de la fréquence.

On peut aussi faire une écriture moyenne sur le spectre de la forme intégrale de l'ETR (Eq. 2.30). Dans le cas de parois noires on a ainsi :

$$\overline{L}_\eta(\vec{r}, \vec{u}) = L_{\eta,b}(\vec{r}_0) \overline{\tau}_\eta(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} L_{\eta,b}(\vec{r}') \left[ - \frac{\partial \overline{\tau}_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})}{\partial l} \right] d\vec{r}' \quad (2.50)$$

Sous cette forme, la corrélation spectrale est supportée uniquement par le terme de dérivée première de la transmittivité moyenne  $\frac{\partial \overline{\tau}_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})}{\partial l}$ .

## 2.5 Méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif

En raison du degré de complexité élevé du problème, il existe peu de situations pour lesquelles l'ETR peut être résolue de manière analytique [Modest, 1993, Siegel and Howell, 1992]. Mais elles sont précieuses pour la validation des codes de calcul. Pour toutes les autres configurations, on est amené à utiliser des méthodes de résolution numériques, adaptées à la forme différentielle ou intégrale de l'équation de transfert radiatif. De façon à mentionner le vocabulaire que nous pourrions utiliser par la suite, nous allons décrire succinctement dans ce paragraphe les méthodes de résolution numérique les plus couramment rencontrées, en ne prétendant nullement à l'exhaustivité.

### 2.5.1 Méthode des zones

La méthode des zones a été initialement introduite par Hottel [Hottel and Sarofim, 1967] et a connu un grand succès pour le calcul du transfert radiatif en ingénierie. Le principe de cette méthode repose sur le partitionnement du volume de gaz et des surfaces englobantes en zones, chacune ayant une température et des propriétés radiatives uniformes. La résolution de l'ETR passe alors par l'évaluation des facteurs d'échange entre zones tenant compte de l'atténuation par le milieu, d'expression différente suivant que l'on considère un échange surface-surface, surface-volume, ou volume-volume. On fait un bilan énergétique sur chaque zone, et on se ramène alors à la résolution d'un système algébrique d'équations linéaires en fonction de la température. La résolution de ce système se fait classiquement par les méthodes de calcul d'algèbre linéaire.

Cette méthode de résolution de l'ETR impose d'avoir des conditions homogènes en température et concentrations dans les éléments discrets (volumes et surfaces) définis comme zones, mais permet sous ces conditions d'avoir des calculs d'une précision très satisfaisante [Olsommer et al., 1997].

### 2.5.2 Méthode des ordonnées discrètes

La méthode des ordonnées discrètes a été proposée pour la première fois par Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1950]. Elle a été très largement utilisée pour ses qualités de rapidité et de précision satisfaisantes dans bon nombre de configurations [Thynell, 1998, Abraham and Magi, 1997, Kim et al., 1991, Park et al., 1999, Sakami et al., 1998, Fiveland, 1984, 1987, 1988, Fiveland and Jamaluddin, 1991, Fiveland and Jessee, 1995, Selçuk and Kayakol, 1997, Truelove, 1987, 1988]. Elle repose sur la discrétisation de l'angle solide total  $\Omega = 4\pi$  en un nombre fini de directions auxquelles sont associés des facteurs de quadrature. L'ETR sous sa forme différentielle est alors résolue de façon approchée pour chaque direction, en chaque point de discrétisation spatiale. La précision de la méthode est dépendante du nombre de points de quadrature choisi, ainsi que des schémas numériques de discrétisation spatiale de l'ETR.

### 2.5.3 Méthode des harmoniques sphériques

Cette méthode est aussi appelée approximation  $P_N$  et repose sur la décomposition de la luminance en chaque point de l'espace sur une base orthogonale d'harmoniques sphériques. La forme mathématique de cette décomposition est bien connue et peut être trouvée dans n'importe quel ouvrage de référence [Case and Zweifel, 1967].

Comme pour toute décomposition sur une base orthogonale, on tend vers l'exactitude lorsque le nombre de termes tend vers l'infini. En pratique on utilise des séries tronquées et le degré de précision dépend du nombre de coefficients retenus. Quand on se limite aux premiers ordres, la méthode est surtout utilisable pour des milieux optiquement épais en absorption ou diffusion. L'approximation  $P_1$  est aussi connue sous la dénomination d'approximation de diffusion.

On trouvera des exemples d'utilisation de la méthode pour des configurations multidimensionnelles dans [Ratzell and Howell, 1983, Mengüç and Viskanta, 1987, Mengüç et al., 1985, Mengüç and Viskanta, 1985]

### 2.5.4 Ray Tracing

Comme précédemment la méthode repose sur une discrétisation angulaire de l'espace de propagation possible du rayonnement en tout point de calcul. Pour chaque direction résultant de la discrétisation, on suit un rayon optique en découpant le trajet en segments supposés isothermes et homogènes [Siegel and Howell, 1992]. La précision de calcul dépend de manière directe du nombre d'angles de calculs choisi, ainsi que du nombre de segments. On peut simplement mentionner que dans le cas de surfaces réfléchissantes, le suivi du rayon jusqu'à son extinction augmente considérablement le temps de calcul.

### 2.5.5 Méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo est une méthode statistique qui permet d'évaluer le transfert radiatif par la génération d'un grand nombre d'événements aléatoires. Elle consiste à rechercher la solution du problème radiatif en recréant les phénomènes qui sont à la base des transferts de chaleur par rayonnement. Le calcul de l'énergie transmise par un point  $P$  donné au reste du système se fait en simulant la propagation à partir de  $P$  d'un grand nombre de rayons dont les caractéristiques sont générés de manière aléatoire sur l'ensemble des valeurs possibles. Chaque rayon est suivi le long de son trajet optique jusqu'à son extinction. Elle reste donc très près de l'image physique qu'on peut se faire des échanges radiatifs dans le milieu. On simule directement le phénomène physique à l'origine des grandeurs à déterminer comme les termes sources volumiques ou les flux radiatifs aux parois. La méthode de Monte Carlo est réputée comme nécessitant des temps de calcul importants mais, comme nous le verrons dans les chapitres suivants, il existe plusieurs voies de recherche pour accélérer et améliorer la convergence de ces calculs.

Par ailleurs, une des hypothèses fondamentales pour appliquer cette technique de simulation étant l'indépendance des tirages aléatoires, elle semble se prêter particulièrement bien à une parallélisation des calculs [Farmer, 1995].

La méthode de Monte Carlo étant une méthode de résolution d'intégrales multiples, une reformulation intégrale du problème de transfert est souvent nécessaire pour accéder à la possibilité d'une optimisation en termes de temps de calcul. Elle est particulièrement intéressante pour les problèmes d'intégration multiple de dimension élevée car c'est la plus complexe des intégrales qui pilote la convergence du calcul, alors que pour les méthodes déterministes le temps de calcul augmente communément à la puissance du nombre d'intégrales (Fig. 2.15).

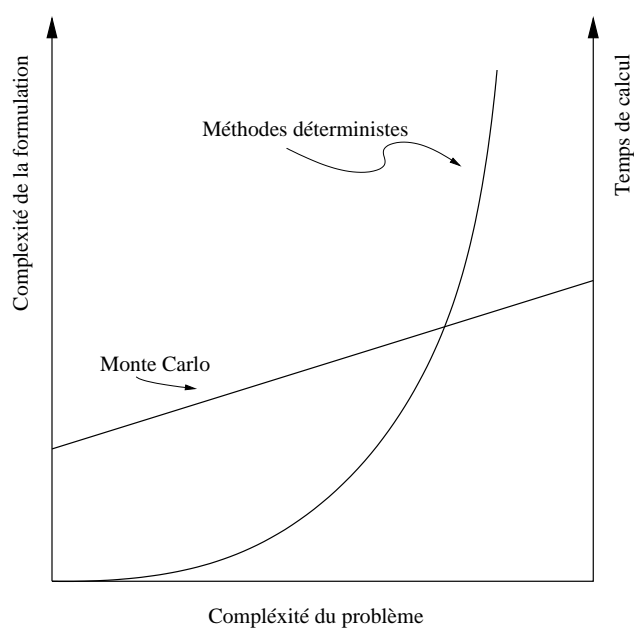


FIG. 2.15 – Efficacité de la méthode d'intégration de Monte Carlo pour un problème complexe.

## Chapitre 3

# Développements méthodologiques dans le contexte de la synthèse d'images

Les algorithmes de rendu en synthèse d'images ont pour objectif de générer des images réalistes. Ils s'appuient sur les lois physiques de transfert du rayonnement posées au chapitre précédent. En particulier, l'équation fondamentale de la synthèse d'images décrivant le champ de luminance dans la scène n'est rien d'autre qu'une forme de l'équation de transfert radiatif. Après une introduction concernant les problèmes spectraux liés au rendu d'une scène, nous présentons les principaux modèles d'illumination utilisés en synthèse d'images, ainsi que certains algorithmes proposés dans ce contexte en tenant compte de la présence de sources et de capteurs <sup>1</sup>. Enfin, nous terminerons en donnant les règles principales d'une conception orientée objet.

Un premier point spécifique dans le contexte de la synthèse d'image est que le domaine spectral considéré est en général restreint au visible, soit une plage de  $380nm$  à  $780nm$  (domaine indiqué par la Commission Internationale de l'Éclairage (CIE)). Le domaine spectral donné comme étant celui du visible est sujet à quelques variations légères sur les bornes suivant les ouvrages consultés.

### 3.1 De la représentation spectrale à la couleur

Si nous voulons calculer la couleur d'un point de la scène, nous devons d'abord établir l'énergie provenant de ce point suivant les longueurs d'onde. L'aspect spectral est pris en compte généralement en échantillonnant le domaine visible. Un échantillonnage fin tous les  $5nm$  revient à considérer 80 longueurs d'ondes différentes. Or, le calcul de l'image étant refait pour chaque longueur d'onde échantillonnée, cette représentation du spectre mène à des

---

<sup>1</sup>Nous présentons également sans insister les notations développées dans cette logique et qui conduisent à des écritures en intégrales de chemin.

temps de calcul importants dans le domaine de la synthèse d'images <sup>2</sup>. Alors il est souvent fait le choix de se restreindre à 3 longueurs d'onde correspondant au rouge, au vert, et au bleu, afin d'accélérer les calculs <sup>3</sup>. On peut également faire le choix d'une représentation en ondelettes [Claustres et al., 2003].

Quel que soit le choix fait pour la description spectrale adoptée, l'information collectée n'est pas utilisable de façon immédiate en termes de production d'images. Il existe une étape supplémentaire, qui est celle de la conversion de l'information spectrale dont on dispose dans un espace perceptuel de couleurs [CIE, 1971, 1978]. La conversion dans l'espace tri-stimulus de couleurs nommé CIE-XYZ se fait par l'intermédiaire de fonctions de correspondance couleur (color matching functions) (Fig 3.1).

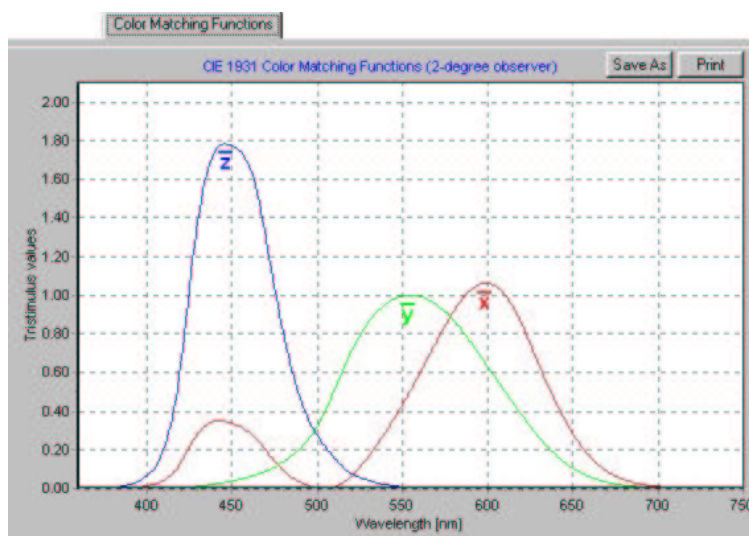


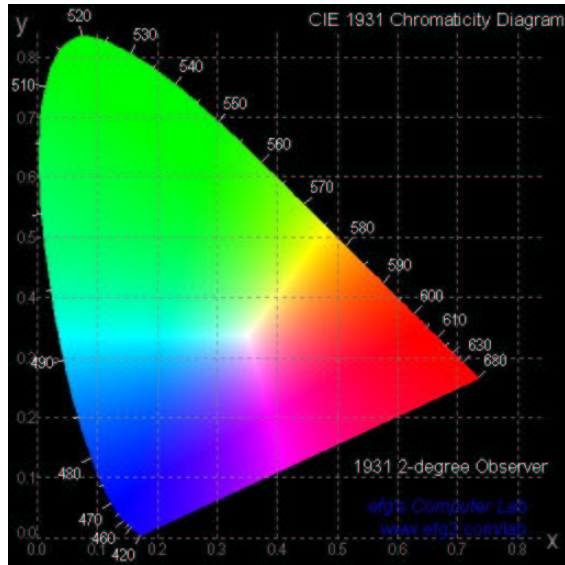
FIG. 3.1 – Fonctions de correspondance des couleurs définies par la CIE. On voit notamment que le rouge participe à la perception du bleu.

Elles ont été établies en tenant compte des spécificités physiologiques de l'œil humain et du côté subjectif de la perception à travers leur définition par un large panel de sujets humains confrontés à des expériences de colorimétrie. Il reste encore à exprimer les données dont nous disposons maintenant en CIE-XYZ, en tenant compte du support d'affichage. On fait alors un changement de repère dans l'espace des couleurs pour obtenir une information dans des bases telles que les bases Rouge-Vert-Bleu (RVB) très utilisée, Teinte-Luminance-Saturation, etc. Cependant, toutes les couleurs pouvant être perçues par l'œil humain, ne peuvent être représentées dans l'espace RVB (Fig. 3.2).

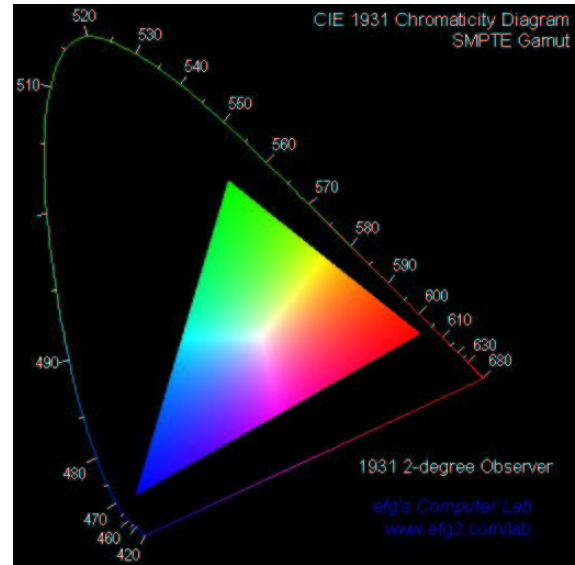
Pour éviter la phase de conversion, il est souvent fait le choix de travailler directement en représentation dans la base RVB, ce qui est une grosse approximation car on ne tient alors

<sup>2</sup>Il convient de rappeler qu'en thermique, un échantillonnage spectral fin revient à effectuer quelques  $10^6$  calculs.

<sup>3</sup>Avec les longueurs d'onde suivantes pour respectivement le rouge, le vert, et le bleu d'après la CIE [Wyszecki and Stiles, 1982] :  $\lambda_{\text{rouge}} = 700 \text{ nm}$ ,  $\lambda_{\text{vert}} = 546.1 \text{ nm}$ ,  $\lambda_{\text{bleu}} = 435.8 \text{ nm}$



(a) Espace de couleurs CIE-XYZ : couleurs perceptibles par l'œil humain.



(b) Couleurs représentables dans un espace colorimétrique Rouge-Vert-Bleu.

FIG. 3.2 – Différence entre couleurs perceptibles et couleurs représentables dans une base RVB.

absolument pas compte, dans ce cas, de la participation d'une couleur à la perception d'une autre. Toutefois, dans un souci de minimiser le temps de calcul, l'adoption de la base RVB comme base de travail peut être considérée comme un bon compromis temps de calcul-qualité de l'image (Fig. 3.3).

Un autre point particulier à la synthèse d'images est la présence systématique d'un capteur. Dans certaines applications des sciences pour l'ingénieur, il se peut cependant aussi qu'on introduise un capteur de type caméra infra-rouge par exemple pour faire une image des échanges thermiques dans un dispositif de combustion. Ainsi, la modification de la position du capteur, modifie le résultat du calcul. Mais d'autre part, on localise également des sources lumineuses distinctes, alors que l'ensemble du système est émissif pour les applications de combustion. Les algorithmes utilisés en synthèse d'images ont alors évolué pour prendre en compte, et utiliser la présence de ces deux entités spécifiques : capteur et source. Un algorithme satisfaisant de création d'une image de synthèse doit être capable de prendre en compte tous les chemins optiques reliant le capteur aux sources lumineuses. Nous exposons ici un descriptif des principaux modèles présents en synthèse d'images, en l'absence de milieu participant.



(a) Image de synthèse calculée dans une base spectrale.



(b) Image de synthèse calculée en RVB.

FIG. 3.3 – Rendu d’une scène en utilisant soit des calculs spectraux, soit des calculs dans une base RVB. Cette image a été produite par Luc Claustre de l’équipe synthèse d’images de l’IRIT.

## 3.2 Modèles locaux

La création d’une image de synthèse réaliste sur un écran d’ordinateur demande de pouvoir afficher sur chaque pixel d’un capteur le rayonnement reçu dans la partie visible du spectre et se dirigeant suivant la direction d’observation (Fig. 1.9), après conversion dans une bande de couleur adaptée à l’affichage de l’écran. Il faut alors pouvoir déterminer comment tout point de la scène est éclairé pour pouvoir faire remonter à la fois les informations d’intensité et de couleur vers l’écran. Comme expliqué au chapitre précédent, on est donc confronté pour calculer l’éclairement de ce point, au fait qu’il dépend de l’ensemble des points éclairés du système par réflexion ou transmission ; ceux-ci dépendent à leur tour de l’éclairement provenant de tout le système. On a par conséquent un problème récursif au niveau géométrique du fait des réflexions multiples, auquel il faut ajouter une dimension spectrale. Nous n’avons ici fait que rappeler que les problématiques en synthèse d’images, et en transfert radiatif sont très similaires.

Pour essayer de simplifier ce problème, Phong [Phong, 1975] propose un modèle local d’illumination dans lequel on cherche à rendre uniquement compte de l’éclairement reçu directement des sources lumineuses présentes dans la scène (Fig. 3.4). On ne tient pas compte du rayonnement reçu indirectement des autres composantes de la scène. Le modèle de Phong est très simple, mais ne respecte ni la loi physique de conservation de l’énergie, ni le principe de réciprocité ; il est basé sur une hypothèse de séparabilité des contributions diffuses et



spéculaires du rayonnement réfléchi. Un modèle d’illumination locale produit des images qui ne peuvent être considérées comme réalistes à cause de cette hypothèse simplificatrice. On cherche cependant parfois à rendre compte de l’éclairage indirect en introduisant un terme d’éclairage *ambient*, qui est considéré comme constant en tout point et en toute direction. Il ne permet donc pas de créer les ombres venant des autres objets éclairés de la scène.

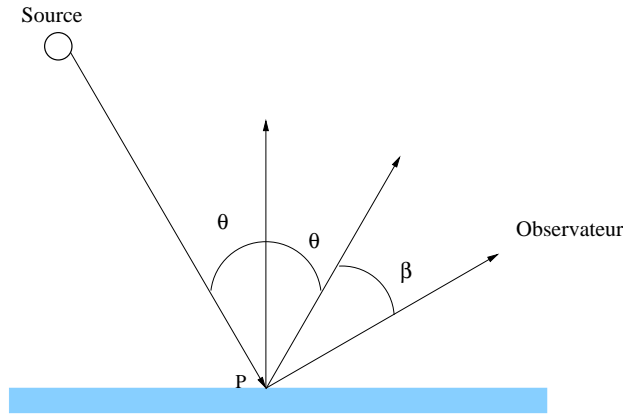


FIG. 3.4 – Modèle d’illumination de Phong

Pour une seule source lumineuse considérée comme ponctuelle (cas d’une scène éclairée par le soleil par exemple) on peut écrire l’intensité réfléchie de manière diffuse en un point par une surface mate par le modèle de Lambert :

$$I_{\lambda}(P) = k_{d,\lambda} \cdot \cos \theta \cdot I_{\text{source},\lambda} \quad (3.1)$$

où  $k_{d,\lambda}$  est un coefficient de réflexion diffuse au point P,  $I_{\text{source},\lambda}$  est l’intensité de la source, et  $\theta$  est l’angle entre la direction de la source et la normale à la surface au point P.

Pour une surface brillante, on écrit l’intensité réfléchie de manière spéculaire :

$$I_{\lambda}(P) = k_{s,\lambda}(\theta) \cdot \cos^n \beta \cdot I_{\text{source},\lambda} \quad (3.2)$$

où  $k_{s,\lambda}$  est un coefficient de réflexion spéculaire au point P (coefficient de Fresnel),  $\beta$  est l’angle entre la direction de l’observateur et le rayon réfléchi, et  $n$  est l’exposant de Phong. L’expression mathématique complète du modèle de Phong pour un nombre  $N_{SL}$  de sources lumineuses est obtenue en sommant les équations 3.1 et 3.2, et en y ajoutant le terme *ambient*  $k_a I_a$  :

$$I_{\lambda}(P) = k_a I_a + \sum_{i=1}^{N_{SL}} k_{d,\lambda} \cos \theta_i I_{i,\lambda} + \sum_{i=1}^{N_{SL}} k_{s,\lambda} \cos^n \beta_i I_{i,\lambda}$$

Le calcul de  $I_{\lambda}(P)$  est identique pour chacune des composantes de la base spectrale choisie.

Le modèle de Phong pris en exemple est le plus simple utilisé en synthèse d’images. C’est aussi celui qui est utilisé par les cartes graphiques (le matériel peut alors évaluer toutes

les équations voulues) pour le rendu en temps réel dans les applications de jeux vidéos par exemple. De très nombreux travaux ont été menés afin de définir des modèles de plus en plus précis pour la réflectance ou la BRDF (bidirectional reflectance distribution function), prenant en compte les phénomènes sub-surfaciques, les aspects spectraux, etc [He et al., 1991, Hanrahan and Krueger, 1993, Lalonde and Fournier, 1997, Claustres et al., 2003].

Bien que donnant parfois des résultats visuellement satisfaisants, les modèles locaux ne peuvent donner une simulation correcte de la scène du fait de la non représentation de l'éclairage indirect. On est donc amené à définir des modèles d'illumination globale, où l'évaluation du rayonnement partant d'un point tient compte du rayonnement réfléchi venant du reste du système.

### 3.3 Modèles globaux

Les modèles d'illumination globale sont des réponses à la question de la résolution de l'équation du rendu (Eq. 3.3), proposée sous sa forme la plus utilisée par Kajiya [Kajiya, 1986], qui s'inspire de l'équation de transfert radiatif et cite l'ouvrage sur le transfert radiatif de Siegel et Howell [Siegel and Howell, 1992] (à l'époque, l'édition de 1981) comme référence (où l'on se rend compte que le lien entre thermique et synthèse d'images n'est pas nouveau).

$$L(x, x') = g(x, x') \left[ L_e(x, x') + \int_{\Omega} \rho(x, x', x'') L(x', x'') dx'' \right] \quad (3.3)$$

Ici  $L(x, x')$  est la luminance totale passant en  $x'$  et se dirigeant vers  $x$ ,  $g(x, x')$  est un terme géométrique (rendant compte de la visibilité entre  $x$  et  $x'$ ),  $L_e(x, x')$  est la luminance émise en  $x'$  vers  $x$ ,  $\rho(x, x', x'')$  représente la partie de la luminance venant de  $x''$ , réfléchi en  $x'$  et allant vers  $x$ , et  $\Omega$  est le demi-espace dans lequel un rayon peut être réfléchi (angle solide  $2\pi$ ), ou transmis (angle  $4\pi$ ). Cette fonction  $\rho(x, x', x'')$  est souvent appelée réflectance bidirectionnelle ou BRDF. Elle peut être vue comme l'équivalent pour une surface de la fonction de phase décrivant la diffusion dans les milieux participants.

La solution de l'équation du rendu peut être trouvée formellement. Ainsi, en posant :

$$(\mathcal{R}L)(x, x') = \int_{\Gamma} \rho(x, x', x'') L(x', x'') dx''$$

où  $\mathcal{R}$  est un opérateur de réflexion, l'équation 3.3 peut se réécrire sous la forme :

$$L = gL_e + g\mathcal{R}L$$

La solution de cette équation s'écrit sous forme de série de Neumann [Sillion and Puech, 1994] :

$$L = \sum_{n=0}^{\infty} (g\mathcal{R})^n gL_e \quad (3.4)$$

L’interprétation de cette solution est assez simple.  $\mathcal{R}$  étant un opérateur de réflexion,  $L$  est la somme de la luminance émise  $gL_e$ , de la luminance réfléchie une fois  $g\mathcal{R}gL_e$ , de la luminance réfléchie deux fois  $(g\mathcal{R})^2gL_e$ , et ainsi de suite. La convergence de cette série est assurée par la loi de conservation de l’énergie. On définit ainsi des familles de chemins optiques par nombre de réflexions subies.

Il peut s’avérer nécessaire de distinguer les différents types de réflexions (diffuse ou spéculaire), et donc de ne pas se contenter d’un opérateur unique  $\mathcal{R}$ . En l’absence de milieu participant, les chemins lumineux *utiles* au calcul de l’image commencent à la source de lumière et se terminent dans le capteur, après 0, 1, ou plusieurs réflexions. Heckbert [Heckbert, 1990] décrit ainsi les événements possibles lors de la propagation d’un rayon lumineux. L’espace des chemins lumineux peut être décrit grâce à la notation :

- L pour une source de lumière (Light)
- E pour le capteur (Eye)
- S pour une réflexion spéculaire (Specular)
- D pour une réflexion diffuse (Diffuse)

L et E sont alors les extrémités des chemins lumineux. De plus, pour pouvoir indiquer la suite des événements (réflexions sans milieu participant) subis par un rayon le long d’un chemin lumineux, on ajoute la grammaire suivante (où  $k$  désigne un événement pouvant être de type S ou D) :

- $(k)^+$  : cela signifie qu’un événement  $k$  se produit une fois ou plus
- $(k)^*$  : cela signifie 0 événement  $k$  ou plus
- $(k)?$  : cela signifie 0 ou 1 événement  $k$
- $(k|k')$  : cela 1 événement  $k$  ou 1 événement  $k'$

Cette notation suffit à décrire l’espace des chemins possibles en l’absence de milieu participant. Par exemple la notation  $LD^+E$  signifie qu’après émission (L), un rayon subit au moins une réflexion diffuse ( $D^+$ ) avant d’atteindre le capteur (E). Cette notation permet de donner le type de chemins lumineux pouvant être simulés par un algorithme, et de connaître finalement les restrictions qu’il peut imposer.

Parmi les algorithmes proposés pour la résolution de l’équation du rendu, nous en évoquons deux qui sont les plus répandus : la méthode des radiosités et les méthodes de lancé de rayons dont les méthodes de Monte Carlo font partie. Nous donnerons, dans le formalisme de Heckbert, les types de chemins optiques pris en compte pour chacune de ces deux méthodes.

### 3.3.1 Méthodes des radiosités

La méthode des radiosités a été introduite à l’origine par des thermiciens [Hottel and Sarofim, 1967, Eckert and Drake, 1959] et adaptée en synthèse d’images par Goral [Goral et al., 1984]. Le système (ou la scène) est divisé(e) en un nombre fini de surfaces supposées lambertiennes. La radiosité quittant la surface  $i$  est  $M_i = L_i.\pi$  (où le terme  $L_i$  désigne la

luminance). Soient deux surfaces  $S_i$  et  $S_j$  portant deux surfaces élémentaires  $dS_i$  et  $dS_j$ , éloignées d'une distance  $l_{ij}$  (Fig. 3.5). Le flux d'énergie envoyée par  $S_i$  vers  $S_j$  est :

$$\phi_e(S_i \rightarrow S_j) = L_i \int_{S_i} \int_{S_j} \frac{\cos \theta_i \cos \theta_j}{l_{ij}^2} dS_i dS_j$$

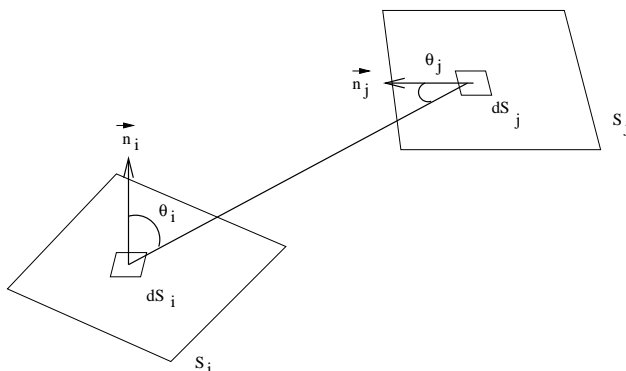


FIG. 3.5 – Illustration du calcul de radiosité entre deux surfaces  $S_i$  et  $S_j$ .

La solution de radiosité est obtenue en faisant le bilan pour chaque surface de toutes les énergies reçues des autres surfaces du système. On obtient un système d'équations à résoudre très similaire à celui de la méthode des zones (ce qui n'est pas étonnant car il s'agit en fait de la même méthode), et dans lequel on peut faire apparaître des facteurs de forme. Limitée aux réflexions diffuses, cette méthode peut s'écrire LD\*E suivant les conventions définies au paragraphe précédent. Après émission (L), un rayon subit éventuellement des réflexions diffuses (D\*), avant d'atteindre le capteur (E).

Des perfectionnements notables ont été apportés à la méthode des radiosités avec la prise en compte des échanges avec les volumes dans le cas de milieux participants [Rushmeier and Torrance, 1987, Arquès et al., 1996], pour retrouver la méthode des zones telle qu'elle est utilisée en transfert radiatif. De plus, Arquès a réalisé une extension de cette méthode aux réflexions spéculaires [Arquès et al., 1997] pour la rendre opérationnelle dans une très large gamme de configurations.

Les hypothèses et limites de cette méthode ont déjà été évoquées dans le chapitre précédent au paragraphe concernant la méthode des zones. Les limitations initiales de la méthode des radiosités ont amené la recherche de méthodes alternatives permettant plus de souplesse, telles que les méthodes de lancé de rayons.

### 3.3.2 Lancé de rayons

Le calcul de l'illumination globale par lancé de rayons est proposé en 1980 par Whitted [Whitted, 1980] à partir de l'algorithme de Appel [Appel, 1968] servant à déterminer les points visibles de la scène. Des rayons sont lancés depuis le capteur (par exemple l'œil de

l'observateur) à travers chaque pixel du plan de projection (par exemple l'écran d'un ordinateur) de la scène. Ces rayons sont appelés rayons *primaires*. Pour chaque rayon, on calcule le point d'intersection avec la géométrie de la scène et on évalue l'illumination globale en ce point. L'illumination directe par les sources est calculée par l'envoi de rayons vers les sources de lumière, appelés rayons *d'ombrage*. Puis l'illumination indirecte est calculée à son tour en lançant des rayons depuis le point d'intersection dans le reste de la scène (rayons *secondaires*). Whitted ne lance qu'un rayon secondaire dans la direction de réflexion spéculaire, et éventuellement un dans la direction de transmission pour les objets translucides, ces directions étant données par les lois de Descartes (Fig. 3.6).

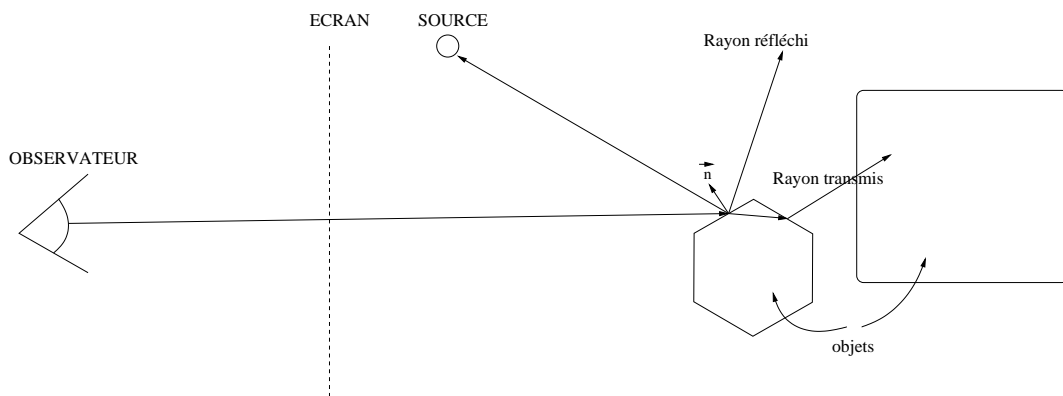


FIG. 3.6 – Calcul de l'illumination globale par lancé de rayons.

Pour éviter les problèmes locaux d'aliasage (disparition d'objets résultant d'un sous-échantillonnage de la scène par un nombre de rayons insuffisant), plusieurs rayons peuvent être générés au lieu d'un seul par pixel. Ils peuvent alors être répartis soit de façon uniforme dans l'image, soit de manière stochastique (lancé de rayons distribué [Cook et al., 1984]).

Dans le lancé de rayons classique, ou ray tracing, l'illumination indirecte est seulement évaluée pour les surface spéculaires en lançant un rayon dans la direction réfléchie. Le ray tracing peut donc décrire des trajets optiques de type :  $LD ?S^*E$ . L'émission (L) est éventuellement suivie d'une réflexion diffuse ( $D ?$ ), et de réflexions spéculaires ( $S^*$ ), avant d'atteindre le capteur (E).

Dans le cas d'un échantillonnage aléatoire de l'espace des chemins lumineux de la scène (calcul de l'illumination par la méthode de Monte Carlo), on parle de tracé de chemins. Le tracé de chemins direct se fait en générant des rayons à partir du capteur. Tous les types de chemins peuvent alors être décrits  $(L(S|D)^*E)$ . Cependant, même si tous les chemins sont possibles, certains demeurent très improbables et, par exemple la réflexion de type miroir peut s'avérer difficile à obtenir sans modification de l'algorithme.

D'autres approches ont été développées pour palier aux défauts manifestes de cette façon de procéder. En particulier, il est difficile de représenter les caustiques (chemins de type

LS<sup>+</sup>DE). Cela demande en effet qu'un rayon partant du capteur subisse une réflexion diffuse, puis une ou plusieurs réflexions spéculaires pour aboutir à la source.

### 3.3.3 Tracé de chemin inverse

C'est un nom paradoxal puisqu'on suit alors les rayons lumineux depuis la source vers le capteur. La source est échantillonnée et des rayons sont émis vers la scène. A chaque intersection, la luminance est envoyée vers le capteur.

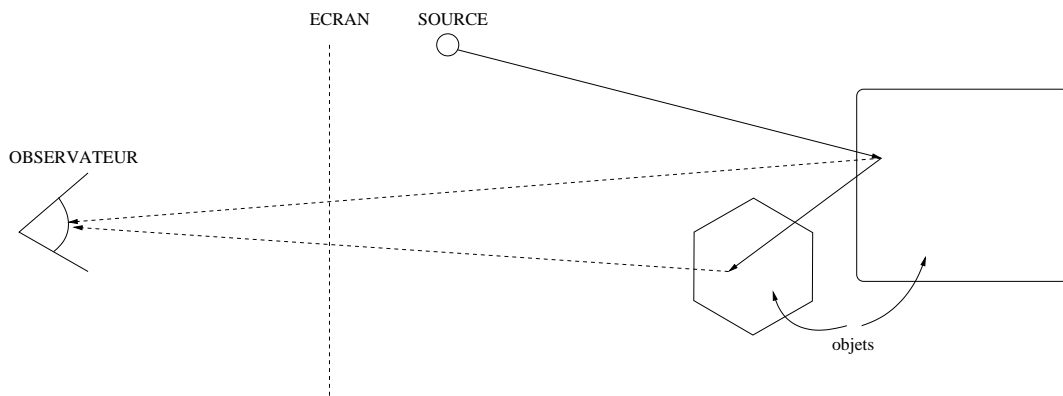


FIG. 3.7 – Tracé de chemin inverse.

Cette façon de procéder représente une façon de régler le problème des caustiques, mais représente très mal les effets de miroir.

### 3.3.4 Tracé bidirectionnel

Lafortune [Lafortune and Willems, 1993] a développé un modèle héritant des qualités des deux précédents en générant une famille de chemins. Un chemin est généré à partir du capteur et chaque événement (D|S) est stocké, jusqu'à un certain nombre d'événements (nœuds du chemin). En faisant la même chose à partir de la source, on obtient deux chemins séparés incomplets. Les chemins sont ensuite reliés entre eux à chaque sommet.

Cette démarche contribue à faire baisser grandement le bruit sur l'image (l'incertitude sur le résultat du calcul par la méthode de Monte Carlo), mais le temps de calcul reste tout de même important.

### 3.3.5 Photon mapping

La technique du photon mapping [Jensen, 2001] conserve les qualités du tracé de chemins bidirectionnel et se fait en deux temps. Dans un premier temps, des photons sont émis de la source lumineuse et en chaque nœud du chemin, on stocke la position du nœud, la direction incidente, et l'énergie du photon (on crée une table de données contenant la cartographie des photons ou photon map). Dans un deuxième temps des chemins sont tracés à partir du

capteur. En chaque point d’intersection avec la scène, on évalue l’illumination en recherchant les  $N$  plus proches photons stockés dans la table. La luminance en ce point est calculée en tenant compte de la BRDF en ce point et en utilisant un filtre (pondération sur les luminances des  $N$  plus proches voisins). Afin d’éviter de créer des défauts dans l’image au niveau des zones de pénombre, on n’utilise pas en fait la photon map pour calculer l’illumination directe, mais pour calculer l’illumination indirecte.

Nous évaluerons pour notre part l’illumination globale en un point de la scène par une méthode de Monte Carlo car elle est particulièrement adaptée à la simulation de phénomènes complexes [Pattanaik and Mudur, 1992, 1993], et donc en envoyant un grand nombre de rayons secondaires (dans la mesure où nous n’avons pas vraiment de source localisée). Nous souhaitons en effet non seulement pouvoir résoudre la complexité spectrale du problème, mais aussi laisser la porte ouverte à l’introduction ultérieure d’autres phénomènes comme la diffusion [Lafortune and Willems, 1996, Pérez et al., 1999, 2000], ou la variation de l’indice optique du milieu [Stam and Languénou, 1996].

Une revue plus détaillée des techniques de résolution de l’illumination globale en présence de milieu participant est fournie par Pérez et al. [Pérez et al., 1997], et reprend bon nombre de méthodes qui ont été exposées dans le chapitre précédent de ce manuscrit. Une étude consacrée spécifiquement au lancé de rayons est proposée par Glassner [Glassner, 1989].

La mise en œuvre effective d’un modèle d’illumination globale requiert au minimum comme données d’entrée une description de la géométrie, des propriétés des matériaux composant la scène, et des sources lumineuses. Elle nécessite également une analyse complète du phénomène à simuler afin de construire une solution qui offre une réutilisabilité intégrale quelle que soit la scène fournie en entrée. Dans cette optique, il paraît nécessaire de s’appuyer sur une méthode de conception à la fois souple dans ses possibilités, et rigoureuse dans son analyse.

### 3.4 Approche objet

Dans la conception de programmes, les problèmes de fiabilité, de souplesse, et de maintenance apparaissent clairement comme des soucis majeurs. Plus un code sera compliqué et construit comme un bloc monolithique, plus les risques d’erreur seront grands. La souplesse du code impose de pouvoir créer de nouvelles fonctionnalités sans devoir réécrire la majeure partie du programme. Il faut donc pouvoir le modifier sans en toucher profondément la structure. Enfin, la maintenance ne peut se faire sans une lisibilité et une structure claire de construction qui permette de retrouver la logique de programmation. C’est pour toutes ces raisons qu’on est amenés à se diriger vers une méthode de conception orientée objet.

Cette démarche doit toujours être présente à l’esprit pour ceux qui, ayant l’habitude de concevoir des programmes de manière traditionnelle, se retrouvent confrontés à un code orienté objet. Le passage par exemple du C au C++ se fait certes en termes de mots clés et de grammaire en faisant quelques ajouts à une base déjà fournie. Mais la phase de conception

est toute autre, et l'esprit qui anime l'analyste est différent.

L'approche objet n'est donc pas limitée à une technique de programmation, mais est un véritable paradigme. Cela signifie qu'elle englobe un ensemble de théories, standards et techniques qui représentent une méthode d'organisation de la connaissance. L'approche objet peut être considérée comme une extension de la programmation modulaire apparue dans les années 1970. Dans la démarche objet, le concept fondamental est celui, par définition, de l'objet. Ce dernier comprend à la fois des attributs (données) et des méthodes associées qui agissent sur ces attributs. Cette notion est appelée *encapsulation*, et constitue un des concepts de base de la programmation orientée objet. L'accès aux attributs d'un objet se fait par l'intermédiaire d'une méthode interface : l'information est masquée et n'est accessible que par des services fournis par l'objet lui-même (*masquage des informations*). L'objet fournit des services en réponse à une requête venant d'un autre objet client. C'est donc un sous-système indépendant, possédant ses propres données et ses traitements, qui fournit des services au reste de l'application. Les objets communiquent entre eux par la transmission de messages et chaque message est destiné à un objet particulier, à la différence d'un appel de fonction pour un mode de conception traditionnel. Le même message adressé à deux objets différent peut être interprété de manière différente (notion de *surcharge*). Dans un modèle orienté objet, le récepteur spécifique d'un message donné n'est en général connu qu'au moment de l'exécution. La méthode à appeler est donc déterminée à ce moment là. L'édition de liens entre le message et la méthode utilisée pour répondre à la requête se fait alors de manière tardive (*liaison tardive*).

Un objet recevant une requête peut ne pas pouvoir répondre directement à la demande de service qui lui est faite. Il est alors amené à déléguer le service à un autre objet. Du point de vue du client, c'est toujours le premier objet qui fournit le service, mais il a utilisé le principe de la *délégation*.

Tous les objets définis sont des instances d'une classe. Une classe est donc une sorte de moule pour créer des objets conformes à la description de la classe. Ces instances sont créées ou détruites au moment de l'exécution. Un objet fournit un service suivant le modèle de la classe dont il est une instance. On peut aussi créer des sous-classes. Ces sous-classes peuvent ensuite définir leurs propres méthodes et être capables de fournir les services définis dans la classe dont ils sont issus (ou super-classe) par le mécanisme de l'*héritage*. Ils peuvent cependant aussi redéfinir la méthode dont ils sont censés hériter de leur classe ancêtre. Une sous-classe pourra donc substituer une méthode à celle de sa super-classe (*polymorphisme*). Enfin, une classe peut avoir plusieurs super-classes et donc hériter des méthodes de plusieurs classes (*héritage multiple*).

On ne parlera donc pas en conception orientée objet de variables, d'affectations, ou de fonctions, mais d'objets, de messages, et de services. Nous cherchons à créer des objets dont le comportement est bien défini et qui se rendent des services entre eux.

L'utilisation d'une conception orientée objet est, comme nous l'avons déjà mentionné, essentielle dans la construction d'outils souples et complexes à la fois. Elle permet notamment



de travailler sur des représentations de l’information qui vont nous permettre de concevoir un outil indépendant des géométries traitées. Ainsi, quelle que soit la forme de l’enceinte de combustion considérée, le fonctionnement de l’outil d’évaluation de bilan radiatif ne sera aucunement altéré.



## Chapitre 4

# Développements de la méthode de Monte Carlo : vers une simulation 3D des transferts radiatifs infra-rouge en milieu gazeux

Le choix de l'utilisation d'une méthode de simulation numérique des transferts radiatifs dans le cas d'une enceinte réelle de combustion combinant une forte complexité géométrique à la présence de spectres de gaz (et de particules) est une question délicate. Elle l'est d'autant plus qu'interviennent des contraintes extérieures telles que celles de la dynamique des fluides ou de la cinétique chimique : exigences de précision, finesse de maillage, fréquence de calcul, etc. Pour choisir la méthode la plus adaptée, nous n'avons pas d'autre choix que de les tester sur des solutions de références pour des conditions qui se rapprochent du problème à traiter. Malheureusement, les solutions de référence dont nous disposons ne proposent en général que des configurations simplifiées au niveau géométrique ou spectral (le développement de solutions de référence a pour cette raison été identifié comme un élément majeur dans le domaine du transfert radiatif [Gritz et al., 1995]). L'application de la méthode retenue pour la résolution de l'ETR au cas réel se fait alors seulement en supposant que l'augmentation de la complexité géométrique et spectrale n'affecte pas le niveau de précision de manière importante. Il n'existe pas à notre connaissance à l'heure actuelle de démarche efficace de validation de ce type de choix dans un cas réel de procédé à haute température.

Dans cet esprit, nous nous fixons ici comme objectif le développement d'un outil permettant la production rapide de solutions de référence en configuration réelle. Nos exigences sont donc :

1. la possibilité de gestion efficace des géométries les plus complexes
2. un contrôle fiable et systématique du niveau de précision.

En contrepartie, nous laissons de côté certaines des contraintes les plus sévères associées usuellement au calcul radiatif en combustion. En particulier, nous ne chercherons pas à produire des champs de termes sources radiatifs volumiques (tel que le demande le couplage avec la CFD) : nous sommes prêts à nous limiter à la possibilité d'estimation de la source

volumique (ou du flux radiatif pariétal) en quelques points de contrôle si l'estimation de l'ensemble du champ s'avère numériquement trop exigeant. Nous ne nous fixons pas non plus les critères de temps de calcul associés aux besoins d'itération de la CFD : nous nous limitons aux contraintes de calcul typiques des phases de contrôle et de validation méthodologique en milieu ingénieur, c'est à dire que nous pensons à des temps de calcul dans une plage allant de quelques minutes à quelques heures. Nous pensons donc uniquement, à ce stade, à un outil de contrôle de grande précision à utiliser en parallèle des outils numériques moins précis mais beaucoup plus rapides tels qu'ils émergent en particulier dans le domaine de la CFD aujourd'hui (typiquement une méthode  $S_4$  avec un modèle spectral en somme de gaz gris).

Face à cet objectif de production de solutions de référence, nous nous orientons vers une résolution de l'ETR sous sa forme intégrale par la méthode de Monte Carlo. Cette orientation est justifiée par l'efficacité reconnue des méthodes statistiques par rapport aux méthodes déterministes lorsque la complexité du domaine d'intégration est élevée, ce qui est le cas dans les problèmes de combustion de par la combinaison des dimensions spectrales et géométriques. Une première conséquence du choix d'une méthode statistique est la possibilité d'évaluer le degré de confiance que nous pourrions avoir dans les résultats obtenus, ceci à travers le calcul systématique de leur écart-type : nous satisfaisons donc ainsi à notre exigence de contrôle de précision. D'autre part, des calculs de sensibilités aux paramètres du système sont également possibles avec la méthode de Monte Carlo sans effort de calcul supplémentaire. Il s'agit là d'un produit dérivé de la méthodologie telle que nous l'envisageons, qui peut faire que notre outil de production de solutions de référence puisse également s'avérer utile comme soutien à l'analyse dans les phases de dimensionnement de systèmes telles qu'elles se présentent aujourd'hui en milieu ingénieur.

Notre choix de la méthode de Monte Carlo s'appuie aussi sur la possibilité d'intégrer des développements récents sur la formulation de l'équation de transfert radiatif et l'optimisation des tirages aléatoires. Une partie de ces travaux a été initiée dans notre groupe, notamment par de Lataillade [de Lataillade et al., 2002b] qui a proposé une solution aux problèmes numériques de la méthode de Monte Carlo pour les milieux épais et a fait la démonstration de la validité de ces avancées méthodologiques dans des géométries monodimensionnelles.

Après un bref exposé sur le principe de l'intégration par la méthode de Monte Carlo, et l'introduction de fonctions de densité de probabilités servant à guider les tirages aléatoires, nous retravaillerons l'équation de transfert radiatif, en incluant notamment le principe de réciprocité des chemins lumineux. Nous exposerons ensuite les fonctions de densité de probabilités que nous utilisons et qui ont été adaptées pour les géométries tridimensionnelles. Enfin, nous finirons en donnant un exemple d'application sur une géométrie cylindrique correspondant à un cas usuel en combustion.

## 4.1 Intégration par la méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo peut être vue de deux façons différentes : une reconstruction statistique de phénomènes de transport particulaire (ici de photons) ou une méthode souple pour le calcul numérique d'intégrales multiples [Hammersley and Handscomb, 1967]. Dans les deux cas, la méthode consiste pour notre problème à simuler la propagation d'un grand nombre de rayons dans le domaine de l'infra-rouge, et à comptabiliser les échanges entre la maille où ils ont été produits et les mailles traversées. Si l'on choisit de mettre en avant l'image d'un calcul d'intégrales multiples, alors nous pouvons dire que nous utilisons la méthode de Monte Carlo pour résoudre l'ETR sous sa forme intégrale (Eq. 2.30). Avant de détailler la procédure de résolution que nous avons choisie, nous faisons un bref rappel du principe général d'intégration par la méthode de Monte Carlo, avec introduction de fonctions de densité de probabilité permettant d'orienter les tirages aléatoires.

### 4.1.1 Principe de la méthode

Nous n'exposons ici que les bases de l'intégration par la méthode de Monte Carlo, sans explorer sans doute tous les aspects nécessaires à un utilisateur débutant désirant s'approprier cette technique. Elle est cependant exposée dans de nombreux ouvrages qui pourront aider des lecteurs dans cet état d'esprit [Hammersley and Handscomb, 1967, Yang et al., 1995, Farmer, 1995, Dutre, 1996, Veach, 1997].

Soit  $I$  l'intégrale d'une fonction  $f(x)$  définie sur un intervalle  $D$  :

$$I = \int_D f(x) dx$$

Nous introduisons une nouvelle fonction  $p(x)$  qui nous sert simultanément à multiplier et à diviser  $f(x)$  ; nous avons toujours le droit d'effectuer cette opération qui ne change fondamentalement rien, à condition que  $p(x)$  soit définie et non nulle sur  $D$  :

$$I = \int_D \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx$$

Sans rien changer, on peut poser  $\frac{f(x)}{p(x)} \times p(x) = f(x) = g(x)p(x)$  :

$$I = \int_D g(x)p(x) dx$$

Cette fonction  $p(x)$  peut être considérée comme une fonction de densité de probabilité (que nous noterons par la suite pdf, comme *probability density function*) s'il s'agit d'une fonction positive et normalisée :

$$\int_D p(x) dx = 1$$

Définissons maintenant une variable aléatoire  $Y = g(X)$ , où  $X$  est une variable aléatoire sur  $D$  distribuée selon  $p$ . Alors,  $I$  est l'espérance de la variable aléatoire  $Y$  :

$$I = \int_D g(x)p(x)dx = E[Y] = E[g(X)]$$

Soient maintenant  $x_1, x_2, \dots, x_N$ , une série de réalisations indépendantes de  $X$ . L'intégrale  $I$  est alors la limite de la moyenne des  $g(x_i)$  lorsque  $N \rightarrow \infty$  :

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i)$$

On ne peut donc formellement calculer  $I$  qu'à partir d'un nombre infini de réalisations. A partir d'un nombre fini, suffisamment élevé de réalisations, on peut seulement calculer un estimateur de  $I$  :

$$I = E[g(X)] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) = \langle g(X) \rangle_N$$

où  $\langle \rangle_N$  symbolise une moyenne d'ensemble sur les  $N$  réalisations. A cette évaluation, on peut associer une "incertitude statistique" qui correspond à l'écart-type de l'estimateur :

$$\sigma(\langle g(X) \rangle_N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(g(X)) \quad (4.1)$$

où  $\sigma$  symbolise l'écart type. De même que  $E[g(X)]$ ,  $\sigma(g(X))$  n'est pas à priori accessible de façon exacte. Mais on peut l'approximer à l'aide des  $N$  réalisations disponibles :

$$\sigma(g(X)) \approx \sqrt{[\langle g(X)^2 \rangle_N - \langle g(X) \rangle_N^2]} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [g(x_i)^2 - \langle g(X) \rangle_N^2]} \quad (4.2)$$

On retient donc :

$$\sigma(\langle g(X) \rangle_N) \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{[\langle g(X)^2 \rangle_N - \langle g(X) \rangle_N^2]} \quad (4.3)$$

La première constatation est que la variance peut toujours être réduite par un tirage d'échantillons plus important. Ceci assure une convergence certaine quel que soit le problème étudié, pourvu que l'on dispose des ressources de calcul suffisantes pour le mener à bien dans un temps donné. On voit aussi que la précision sur l'estimateur de  $I$  est dépendante de la fonction  $g(x)$  que nous avons introduite, et donc directement de  $p(x)$ . Cela signifie que pour un même nombre  $N$  de réalisations de  $x_i$ , nous avons un moyen supplémentaire, et très important, de jouer sur la qualité de l'estimateur de  $I$ . La différence vient de la variance de  $g(X)$ , donc de la manière dont les  $x_i$  sont générés du fait de l'introduction de  $p(x)$ .

**Création d'un générateur aléatoire** Dans le cas d'une variable aléatoire de densité de probabilité  $p$  sur un espace monodimensionnel, un générateur aléatoire correspondant peut parfois être obtenu simplement à partir de la fonction de répartition ou cumulative  $c$  :

$$c(x) = \int_{\text{borne}_{\text{inf}}}^x p(x') dx'$$

où  $\text{borne}_{\text{inf}}$  est la borne inférieure du domaine de définition. Les propriétés fondamentales de la cumulative  $c$  sont que :  $c$  est monotone (donc inversible), et si une variable aléatoire  $X$  est distribuée suivant  $p$ , alors  $Y = c(X)$  est une variable aléatoire distribuée uniformément sur l'intervalle  $[0, 1]$ . Etant données ces propriétés, en supposant que nous disposons d'un générateur aléatoire sur  $[0, 1]$ , on peut réaliser une génération aléatoire  $y_i$  de  $Y$ , et en déduire une valeur  $x_i = c^{-1}(y_i)$ . Si nous voulons utiliser cette propriété (qui conduit généralement à des générations aléatoires peu coûteuses), nous sommes donc contraints d'utiliser des densités de probabilités dont nous savons simplement inverser la cumulative. Nous verrons, dans le paragraphe dédié à la génération d'un coefficient d'absorption selon le modèle de Malkmus, qu'il peut exister des moyens de contourner élégamment cet impératif [Michael et al., 1976]. Dans tous les cas de figure, il est nécessaire de disposer d'un générateur aléatoire sur  $[0, 1]$  fiable [Press et al., 1992, James, 1994].

#### 4.1.2 Exemple d'intégration par la méthode de Monte Carlo

Pour bien comprendre l'importance du choix d'une fonction de densité de probabilité, nous avons choisi de prendre un exemple simple d'intégration d'une fonction  $f(\theta)$ . Elle correspond à l'émission radiative monochromatique d'une couche monodimensionnelle d'épaisseur  $e$ , avec un coefficient d'absorption  $\kappa$  :

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(\theta) d\theta = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right] d\theta$$

$\theta$  est ici l'angle entre chaque rayon émis par la couche et la normale sortante à cette couche de gaz.

Nous posons alors le problème de déterminer une loi  $p(\theta)$  de tirage angulaire, conduisant à de bonnes qualités de convergence pour différentes valeurs du coefficient d'absorption  $\kappa$ . Le choix de  $p(\theta)$  n'affectera en aucune manière la justesse du calcul, mais aura une incidence sur l'incertitude pour un nombre de tirages fixé  $N$ <sup>1</sup>.

Nous distinguons alors deux cas : un cas de faible épaisseur optique et un cas de forte épaisseur optique :

- A la limite optiquement faible,  $\kappa e \ll 1$  et on peut alors utiliser un développement

---

<sup>1</sup>Nous utilisons ici une intégrale qui peut être résolue de façon analytique pour illustrer l'importance du choix d'une pdf. En pratique, nous rencontrerons presque le même intégrale, mais nous ne pourrons pas la résoudre analytiquement.

limité de  $f(\theta)$  pour rendre compte grossièrement de ces variations :

$$f(\theta) = \cos \theta \sin \theta \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right] \approx \kappa e \sin \theta$$

Le but étant de faire apparaître une fonction  $g(\theta)$  dont on fera la moyenne pour obtenir une estimation de  $I$ , et pour laquelle les réalisations successives  $g(\theta_i)$  présentent le moins de dispersion possible, on peut choisir  $p(\theta) = \sin \theta$ . L'intégrant exact conserve une partie angulaire et n'est pas constant, mais le  $\cos \theta$  en facteur de l'exponentielle vient compenser celui de son argument à la limite linéaire. Les variations de l'intégrant  $g(\theta)$  sont alors minimales et on obtient une variance faible :

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} g(\theta) p(\theta) d\theta = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right] d\theta \quad (4.4)$$

avec :

$$\begin{aligned} p(\theta) &= \sin \theta \\ g(\theta) &= \cos \theta \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right] \\ I &\approx \left\langle g(\theta) \right\rangle_N = \left\langle \cos \theta \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right] \right\rangle_N \\ \kappa e &\ll 1 \Rightarrow g(\theta) \approx \kappa e \quad (\text{faible variance}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Il convient, encore une fois, de remarquer que le choix d'une fonction de densité de probabilité adaptée à un cas optiquement mince ne signifie pas que l'on ne peut calculer une valeur de  $I$  que pour de faibles épaisseurs optiques. Aux épaisseurs optiques intermédiaires ou fortes, les qualités de convergence seront seulement moins bonnes, mais l'exactitude du résultat restera assuré à la limite d'un grand nombre de tirages.

- Dans le cas où l'argument de l'exponentielle ne peut plus être considéré comme petit, le  $\cos \theta$  en facteur va devenir une source de variation importante de la valeur de l'intégrant si on le conserve dans l'expression de celui-ci. On choisit donc une pdf qui le prend en compte, soit  $p(\theta)$  proportionnel à  $\sin \theta \cos \theta$ <sup>2</sup>.

$$\begin{aligned} p(\theta) &= 2 \sin \theta \cos \theta \\ g(\theta) &= \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right] \\ I &\approx \left\langle g(\theta) \right\rangle_N = \left\langle 1 - \exp\left(-\frac{\kappa e}{\cos \theta}\right) \right\rangle_N \\ \kappa e &\gg 1 \Rightarrow g(\theta) \approx 1 \quad (\text{faible variance}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

<sup>2</sup>En fait, comme la pdf doit être normalisée sur le domaine d'intégration, on prend  $pdf(\theta) = 2 \sin \theta \cos \theta$ .



On a donc défini deux lois de tirage, dont la pertinence dépend de l'épaisseur optique  $\kappa e$ . On peut choisir indifféremment une de ces deux lois selon la valeur de l'épaisseur optique. On peut par exemple choisir la première pour  $\kappa e < 1$ , et la seconde sinon, ou encore chercher à définir une pdf adaptée aux épaisseurs optiques intermédiaires.

Dans le cas d'une intégrale multiple où l'épaisseur optique peut être variable, par exemple dans le cas où  $\kappa$  est aussi généré aléatoirement, cela suppose qu'il faut, soit estimer à priori une valeur moyenne de  $\kappa$ , soit tirer  $\kappa$  avant  $\theta$ . Le choix de l'ordre de tirage des variables aléatoires pour la résolution numérique d'une intégrale multiple sera donc parfois une conséquence des choix d'optimisation de pdf que nous serons amenés à faire.

## 4.2 Ecriture de l'ETR en puissances nettes échangées (PNE)

Dans notre double démarche de résolution de l'ETR, et notre envie d'analyse et de décomposition des échanges du système (qui peut ensuite nous guider dans l'optimisation des calculs), nous désirons distinguer les contributions spatiales au terme source calculé.

Ceci peut passer par l'inclusion d'un principe fondamental des échanges radiatifs : le principe de réciprocité des chemins lumineux [Hottel and Sarofim, 1967, Green, 1967, Cherkaoui, 1993, Dufresne et al., 1998, 1999] dont une conséquence est que : sous nos hypothèses de travail, si deux mailles (notées respectivement 1 et 2) sont à la même température, alors la puissance nette échangée entre elles est nulle ( $\varphi_{1 \leftrightarrow 2} = -\varphi_{2 \leftrightarrow 1} = 0$ )<sup>3</sup>. Or dans ce cas, quelle que soit la méthode de résolution choisie de l'ETR dont la base est l'émission de rayons, ce principe ne peut être satisfait qu'à la limite où le nombre de rayons tend vers l'infini. Dans le cas contraire, et par exemple dans l'évaluation d'un échange entre deux surfaces de températures voisines, nous sommes toujours exposés à un risque numérique d'obtenir une valeur de l'échange net radiatif dont le signe ne serait pas le bon, l'échange de chaleur pouvant être orienté de la surface la plus froide vers la surface la plus chaude. Cela correspond à une redistribution non physique de l'énergie au sein du système. Nous souhaitons donc parvenir à une formulation satisfaisant de manière intrinsèque le principe de réciprocité des chemins lumineux pour éviter de rencontrer ce type de problèmes numériques. Nous repartons pour cela de la forme différentielle de l'ETR (Éq. 2.29) :

---

<sup>3</sup>En d'autres mots, il permet d'échanger les positions de la source et du récepteur sans modifier le résultat d'une mesure.

$$\begin{aligned}
S_r(\vec{r}_i) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_r(\vec{r}_i) \\
&= -\vec{\nabla} \cdot \int_{4\pi} \vec{u} L_\eta(\vec{r}_i, \vec{u}) d\Omega \int_0^\infty d\eta \\
&= -\int_0^\infty d\eta \int_{4\pi} d\Omega \underbrace{\frac{\partial}{\partial l} L_\eta(\vec{r}_i, \vec{u})}_{\text{Eq. (2.29)}} \\
&= \int_0^\infty d\eta \int_{4\pi} d\Omega \left[ \kappa_\eta(\vec{r}_i) L_\eta(\vec{r}_i, \vec{u}) - \kappa_\eta(\vec{r}_i) L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right]
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Ce qui devient, en y réinjectant l'équation 2.30 donnant une expression de la luminance  $L_\eta(\vec{r}_i, \vec{u})$  :

$$\begin{aligned}
S_r(\vec{r}_i) &= \int_0^\infty d\eta \int_{4\pi} d\Omega \left( \kappa_\eta(\vec{r}_i) \left[ L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u}) \tau_\eta(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_i) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_i} L_{\eta,b}(\vec{r}') \kappa_\eta(\vec{r}') \tau_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_i) d\vec{r}' \cdot \vec{u} \right] \right. \\
&\quad \left. - \kappa_\eta(\vec{r}_i) L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

En suivant la démonstration de Fournier [Fournier, 1994], on écrit cette équation pour une cavité à l'équilibre radiatif à température  $T = T(\vec{r}_i)$ . Les luminances deviennent donc toutes équivalentes à la luminance du rayonnement d'équilibre  $L_{\eta,b}(\vec{r}_i)$ , au nombre d'onde  $\eta$  :

$$\begin{aligned}
S_r(\vec{r}_i) = 0 &= \int_0^\infty d\eta \int_{4\pi} d\Omega \left( \kappa_\eta(\vec{r}_i) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \tau_\eta(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_i) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_i} L_{\eta,b}(\vec{r}') \kappa_\eta(\vec{r}') \tau_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_i) d\vec{r}' \cdot \vec{u} \right] \right. \\
&\quad \left. - \kappa_\eta(\vec{r}_i) L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Puisque ce terme source radiatif est nul, on peut retirer l'équation 4.9 à l'équation 4.8, pour obtenir une nouvelle forme de l'ETR :

$$\begin{aligned}
S_r(\vec{r}_i) &= \int_0^\infty d\eta \int_{4\pi} d\Omega \left( \kappa_\eta(\vec{r}_i) [L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u}) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i)] \tau_\eta(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_i) \right. \\
&\quad \left. + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_i} \kappa_\eta(\vec{r}') [L_{\eta,b}(\vec{r}') - L_{\eta,b}(\vec{r}_i)] \kappa_\eta(\vec{r}') \tau_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_i) d\vec{r}' \cdot \vec{u} \right)
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Les points  $\vec{r}_0$  sont par définition les points d'origine (situés sur les parois du système) du rayonnement parvenant au point  $\vec{r}_i$ . Pour plus de simplicité dans la poursuite de ce travail de formulation, appliquons cette dernière équation dans le cas de parois noires où on peut

écrire  $L_\eta(\vec{r}_0, \vec{u}) = L_{\eta,b}(\vec{r}_0)$ . L'équation 4.10 ne fait plus alors apparaître que des différences de luminances noires :

$$S_r(\vec{r}_i) = \int_0^\infty d\eta \int_{4\pi} d\Omega \left( \kappa_\eta(\vec{r}_i) [L_{\eta,b}(\vec{r}_0) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i)] \tau_\eta(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_i) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_i} \kappa_\eta(\vec{r}_i) [L_{\eta,b}(\vec{r}') - L_{\eta,b}(\vec{r}_i)] \kappa_\eta(\vec{r}') \tau_\eta(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_i) d\vec{r}' \cdot \vec{u} \right) \quad (4.11)$$

Il est clair sous cette forme que nous avons identifié les contributions au bilan radiatif en un point, d'une part des puissances nettes échangées avec les éléments de paroi (premier terme du second membre), mais aussi avec tous les points du milieu gazeux (deuxième terme du second membre). Il est aisé à partir de cette écriture de discerner la contribution particulière associée à un élément de surface  $dS_j$  ou à un élément de volume défini  $dV_j$ .  $dS_j$  est ici la surface sur laquelle on peut choisir  $\vec{r}_0$ , et  $dV_j$  le volume dans lequel on peut choisir  $\vec{r}'$ . Cette formulation fait donc apparaître individuellement les contributions d'un système maillé tel qu'utilisé traditionnellement en mécanique des fluides par exemple (Fig 4.1).

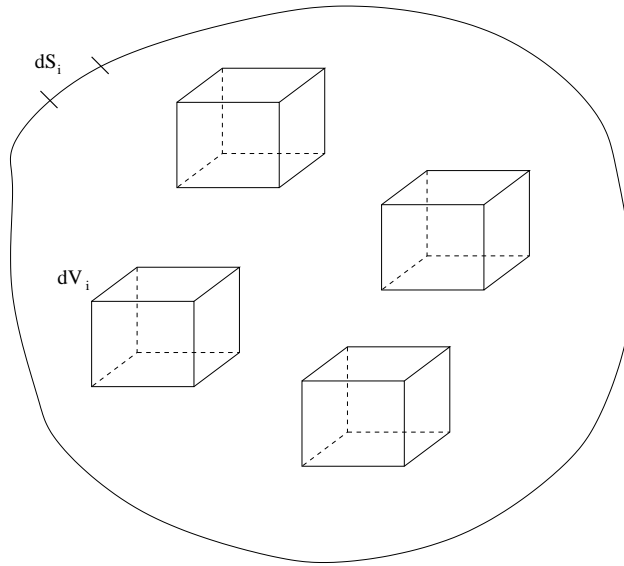


FIG. 4.1 – Découpage du système en zones d'échanges : volumes et surfaces.

En suivant la démonstration de de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001], on effectue ensuite un changement de variable qui permet de faire apparaître les volumes  $V_j$  et les surfaces  $S_j$  composant le système au détriment de l'angle solide  $d\Omega$  :

$$\begin{aligned} d\Omega dl &= \frac{1}{l_{ij}^2} dV_j \\ d\Omega &= \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}}{l_{ij}^2} dS_j \end{aligned}$$

où  $l_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$ , et  $\vec{r}_i$  est le point pour lequel on fait le bilan radiatif,  $\vec{r}_j = \vec{r}_0$  pour les contributions de la surface  $j$ ,  $\vec{r}_j = \vec{r}'$  pour la contribution du volume  $j$ ;  $\vec{n}_j$  est la normale à la surface  $S_j$  au point  $\vec{r}_j$ .

L'application de ce changement de variable à l'expression du terme source radiatif (Eq. 4.11) fait apparaître plus explicitement les contributions des éléments du système au terme source radiatif en un point (Eq. 4.12) :

$$S_r(\vec{r}_i) = \int_0^\infty d\eta \left( \int_S \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] dS_j + \int_V \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \kappa_\eta(\vec{r}_j) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] dV_j \right) \quad (4.12)$$

Nous avons donc écrit le bilan radiatif en un point quelconque du système repéré par le vecteur  $\vec{r}_i$  dans l'espace. En génie des procédés, il est souvent utile de rechercher le terme source d'un volume fini de gaz (ou d'une surface), en vue de coupler le rayonnement à la mécanique des fluides. On peut facilement le déduire de l'équation précédente en intégrant  $S_r(\vec{r}_i)$  sur le volume  $V_i$  auquel il appartient :

$$S_r(V_i) = \int_0^\infty d\eta \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \left( \int_S \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] dS_j + \int_V \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \kappa_\eta(\vec{r}_j) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] dV_j \right) \quad (4.13)$$

Nous pouvons alors décrire une matrice d'échange entre zones du système à étudier en calculant successivement tous les bilans radiatifs qui leur correspondent. Nous avons là un édifice formel permettant de décomposer le bilan radiatif d'un volume ou d'une surface en somme de puissances nettes échangées avec l'ensemble des éléments de volume et de surface du système. De plus, l'écriture en différences de luminances noires, assure le respect du principe de réciprocité des chemins lumineux *quel que soit le type d'approximation apporté ultérieurement aux intégrales géométriques* (par exemple en utilisant un nombre fini de rayons).

Nous distinguons dans l'équation 4.13 les échanges avec les volumes et les surfaces sous la forme :

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} = \int_0^\infty d\eta \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{V_j} dV_j \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \kappa_\eta(\vec{r}_j) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \quad (4.14)$$

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} = \int_0^\infty d\eta \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \quad (4.15)$$

Alors, on peut simplement écrire le bilan radiatif d'un volume comme la somme des bilans avec tous les autres volumes du système et toutes les surfaces du système. Ainsi, si on découpe

le système en  $N_v$  volumes et  $N_s$  surfaces, on a :

$$S_r(V_i) = \sum_{j=1}^{N_v} \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} + \sum_{j=1}^{N_s} \varphi_{V_i \rightarrow S_j} \quad (4.16)$$

De manière similaire on peut définir l'échange radiatif net entre deux surfaces :

$$\varphi_{S_i \leftrightarrow S_j} = \int_0^\infty d\eta \int_{S_i} dS(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{(\vec{u} \cdot \vec{n}_i)(\vec{u} \cdot \vec{n}_j)}{l_{ij}^2} \tau_\eta(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \quad (4.17)$$

Sur ces écritures concernant les échanges radiatifs nets entre éléments de volume, entre un élément de volume et une surface, et entre éléments de surface, on distingue une structure commune et ils se composent tous trois d'une partie énergétique (différence de luminances noires), d'une partie géométrique, et d'une partie représentant la transmission entre les deux éléments. On retrouve également la forme des termes optico-géométriques définis dans la méthode des zones, employant la formulation de Hottel ([Siegel and Howell, 1992]).

Le terme de transmission  $\tau_\eta(l_{ij})$  entre le point  $\vec{r}_i$  et le point  $\vec{r}_j$  contient toute la physique d'absorption du rayonnement entre les deux points. Il dépend bien sûr fortement de la longueur d'onde se propageant entre les deux points et demande une description spectrale fine.

Cette formulation en échanges nets assure bien que l'échange entre deux éléments de même température sera nul, car on exprime directement la différence de température dans la formulation. Ainsi, il est impossible d'aboutir lors d'un calcul numérique à une estimation de puissance nette échangée négative alors qu'elle devrait être positive (ce qui correspondrait à une situation non physique où une zone froide réchauffe une zone chaude). D'autre part la conservation de l'énergie est satisfaite puisque par définition  $\varphi_{1 \leftrightarrow 2} = -\varphi_{2 \leftrightarrow 1}$ .

Remarque : Si nous disposons de deux estimateurs séparés de  $\varphi_{1 \leftrightarrow 2}$  et  $\varphi_{2 \leftrightarrow 1}$ , il suffit de conserver le plus précis pour assurer la conservation de l'énergie sans perte de réciprocité.

Enfin, nous sommes capables de distinguer les contributions des différentes mailles. Cela permet dans une situation physique connue (par exemple dans un four où l'on veut calculer le bilan radiatif d'une paroi pour lequel seuls les échanges avec le front de flamme vont effectivement intervenir) de choisir de calculer seulement les contributions qui comptent pour un bilan radiatif, et éviter des calculs entre mailles de même température dont l'échange net (résultat des émissions et absorptions réciproques) est nul par définition.

Nous n'avons pas tenu compte des propriétés de réflexion des parois dans les développements mathématiques exposés dans ce chapitre. Cela demande un exercice de formulation plus complexe (exactement dans le même esprit qui a mené à l'établissement de l'équation 3.4), mais qui ne change fondamentalement rien aux principes que nous avons exposés.

### 4.3 Modèle en bandes étroites et modèle de Malkmus

Comme nous l'avons vu précédemment, les bandes étroites sont caractérisées pour un modèle de répartition des raies de Malkmus par deux paramètres seulement :  $\bar{k}$  (coefficient d'absorption par unité de pression) et  $\phi$  (paramètre de forme dépendant de la demi-largeur à mi-hauteur des raies et de l'espacement moyen entre deux centres de raies) [Malkmus, 1967] (cf. chapitre 2, Eq. 2.33).

Les espèces gazeuses rayonnantes pour lesquelles nous disposons des données nécessaires à un modèle de bandes étroites <sup>4</sup> sont  $H_2O$ ,  $CO_2$ , et  $CO$ .

Pour  $H_2O$  les données sont présentes pour toutes les bandes, soit 367 bandes de largeur  $25cm^{-1}$  correspondant à des centres de raies entre  $150cm^{-1}$  et  $9300cm^{-1}$ . Pour les autres gaz, les paramètres ne sont pas donnés dans les régions où ils ne présentent pas de raie d'absorption, c'est-à-dire pour les régions spectrales transparentes pour ces gaz. Ainsi pour le  $CO_2$ , nous avons seulement des données pour 96 bandes, et les données pour le  $CO$  représentent 48 bandes <sup>5</sup>.

Pour chaque gaz, nous disposons des valeurs de  $\bar{\delta}$  et  $\bar{k}$  pour 14 températures différentes, de 300K à 2900K avec un pas de 200K. Les valeurs pour des températures intermédiaires sont simplement calculées par interpolation linéaire.

De plus, le paramètre  $\bar{\gamma}$  (en  $cm^{-1}$ ), représentant la demi-largeur moyenne à mi-hauteur d'un ensemble de raies pour un élargissement collisionnel, est supposé indépendant de la bande étroite, et son expression pour les trois gaz est donnée par :

$$\begin{aligned}\overline{\gamma_{H_2O}} &= \frac{P}{P_S} [0.462x_{H_2O}(\frac{T_S}{T}) + (\frac{T_S}{T})^{0.5}(0.079(1 - x_{CO_2} - x_{O_2}) + 0.106x_{CO_2} + 0.036x_{O_2})] \\ \overline{\gamma_{CO_2}} &= \frac{P}{P_S} (\frac{T_S}{T})^{0.7} [0.07x_{CO_2} + 0.058(1 - x_{CO_2} - x_{H_2O}) + 0.1x_{H_2O}] \\ \overline{\gamma_{CO}} &= \frac{P}{P_S} [0.075x_{CO_2}(\frac{T_S}{T})^{0.6} + 0.12x_{H_2O}(\frac{T_S}{T})^{0.7}(1 - x_{CO_2} - x_{H_2O})]\end{aligned}$$

avec  $P_S = 1$  atm et  $T_S = 296$  K, pris comme valeurs de référence, où  $P$  est la pression totale, et le terme  $x_{\text{espèce}}$  représente la fraction molaire d'une espèce rayonnante.

L'expression de la transmittivité moyenne d'une colonne homogène de gaz de longueur  $l$  pour une bande de largeur  $\Delta\nu$  en fonction de ces trois paramètres est ensuite facilement écrite à partir de l'équation 2.33 :

<sup>4</sup>Les données nous ont été fournies par J. Taine et A. Soufiani du laboratoire EM2C [Soufiani and Taine, 1997].

<sup>5</sup>Pour le  $CO_2$  les zones spectrales non transparentes sont :  $450cm^{-1} \rightarrow 1200cm^{-1}$ ,  $1950cm^{-1} \rightarrow 2450cm^{-1}$ ,  $3300cm^{-1} \rightarrow 3800cm^{-1}$ , et  $4700cm^{-1} \rightarrow 5250cm^{-1}$ . Pour le  $CO$ , les bandes contenant des données non nulles sont :  $1750cm^{-1} \rightarrow 2325cm^{-1}$ , et  $3775cm^{-1} \rightarrow 4350cm^{-1}$

$$\bar{\tau}(l) = \exp \left[ -2 \frac{\bar{\gamma}}{\delta} \left( \sqrt{1 + xpl \bar{k} \frac{\delta}{\bar{\gamma}}} - 1 \right) \right]$$

Et on se ramène au modèle à deux paramètres par :

$$\begin{aligned} \bar{\kappa} &= \bar{k} x p \\ \phi &= \frac{2\bar{\gamma}}{\delta} \end{aligned} \quad (4.18)$$

la transmittivité moyenne d'une colonne homogène de longueur  $l$  pouvant s'exprimer à partir de ces deux paramètres :

$$\bar{\tau}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp[-\kappa_\nu l] d\nu = \exp[\phi - \phi^*(l)] = \exp \left[ -\phi \left( \sqrt{1 + \frac{2\bar{\kappa}l}{\phi}} - 1 \right) \right] \quad (4.19)$$

avec

$$\phi^*(l) = \phi \sqrt{1 + \frac{2\bar{\kappa}l}{\phi}}$$

On réécrit alors les équations 4.14, 4.15, et 4.17 en tenant compte du découpage en bandes étroites. Pour cela, on fait simplement apparaître le découpage du spectre en bandes. On n'a donc plus une intégration continue sur le spectre, mais une somme d'intégrations continues (ce qui revient à intégrer continuellement sur le spectre puisque les bandes sont prises adjacentes) :

$$\begin{aligned} \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \int_{\Delta\eta_n} d\eta \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{V_j} dV_j \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \kappa_\eta(\vec{r}_j) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \\ \varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \int_{\Delta\eta_n} d\eta \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}}{l_{ij}^2} \kappa_\eta(\vec{r}_i) \tau_\eta(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \\ \varphi_{S_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \int_{\Delta\eta_n} d\eta \int_{S_i} dS(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{(\vec{u} \cdot \vec{n}_i)(\vec{u} \cdot \vec{n}_j)}{l_{ij}^2} \tau_\eta(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ce qui peut se réécrire de la façon suivante dans le cas d'un milieu aux propriétés radiatives homogènes en utilisant l'hypothèse de bandes spectrales étroites ( $L_{\eta,b}(\vec{r})$  indépendant de  $\eta$  sur chaque bande) :

$$\begin{aligned} \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta\eta_n \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{V_j} dV_j \frac{1}{l_{ij}^2} \frac{\partial^2 \bar{\tau}(l_{ij})}{\partial l_i \partial l_j} \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \\ \varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta\eta_n \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}}{l_{ij}^2} \left( -\frac{\partial \bar{\tau}(l_{ij})}{\partial l_j} \right) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \\ \varphi_{S_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta\eta_n \int_{S_i} dS(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{(\vec{u} \cdot \vec{n}_i)(\vec{u} \cdot \vec{n}_j)}{l_{ij}^2} \bar{\tau}(l_{ij}) \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

où  $l_i$  et  $l_j$  sont les abscisses curvilignes repérant les extrémités du trajet  $l_{ij}$ . Cette formulation permet de faire directement appel au modèle précédent en écrivant simplement que :

$$\bar{\tau}(l) = \bar{\tau}_{H_2O}(l) \times \bar{\tau}_{CO_2}(l) \times \bar{\tau}_{C0}(l) \times \exp[-\kappa_{suie}l] \quad (4.22)$$

où  $\kappa_{suie}$  est le coefficient d'absorption de la suie, supposé gris par bande.

Remarque : L'intervalle spectral est ici restreint à celui pour lequel nous possédons les données caractérisant les bandes de gaz. Dans la pratique nous avons étendu notre intervalle spectral de 0 à  $20000\text{cm}^{-1}$  à la suite de comparaison avec d'autres codes pour tenir compte de la partie rayonnée par la suie dans ces régions à haute température. Nous tenons donc compte des propriétés spectrales des gaz et des suies jusqu'à  $9300\text{cm}^{-1}$ , et au delà nous ne tenons compte que de l'émission et de l'absorption des suies.

## 4.4 Inclusion de la formulation en k-distribution

A ce stade, il est possible d'opter pour une formulation en k-distribution grâce aux transformations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{\tau}(l_{ij})}{\partial l_i \partial l_j} &= \int_0^\infty f(\kappa) \kappa^2 \exp[-\kappa l_{ij}] d\kappa \\ -\frac{\partial \bar{\tau}(l_{ij})}{\partial l_j} &= \int_0^\infty f(\kappa) \kappa \exp[-\kappa l_{ij}] d\kappa \\ \bar{\tau}(l_{ij}) &= \int_0^\infty f(\kappa) \exp[-\kappa l_{ij}] d\kappa \end{aligned} \quad (4.23)$$

qui en inversant les intégrales sur la géométrie et sur le coefficient d'absorption  $\kappa$  conduisent à :

$$\begin{aligned} \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^\infty f(\kappa) d\kappa \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{V_j} dV_j \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa \exp[-\kappa l_{ij}] \kappa \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \\ \varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^\infty f(\kappa) d\kappa \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}}{l_{ij}^2} \kappa \exp[-\kappa l_{ij}] \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \\ \varphi_{S_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^\infty f(\kappa) d\kappa \int_{S_i} dS_i \int_{S_j} dS_j \frac{(\vec{u} \cdot \vec{n}_i)(\vec{u} \cdot \vec{n}_j)}{l_{ij}^2} \exp[-\kappa l_{ij}] \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \end{aligned} \quad (4.24)$$

Nous retrouvons des expressions analogues à celles des équations 4.20 mais nous avons perdu la relation entre la fréquence et le coefficient d'absorption. Les seules dépendances fréquentielles de l'ETR écrite sous cette forme viennent alors du choix de la bande, et de la luminance



noire associée.

Il reste que nous disposons d'une écriture en k-distribution valable uniquement sous l'hypothèse d'un milieu aux propriétés radiatives homogènes. Pour étendre cette expression en tenant compte des inhomogénéités, nous faisons appel à l'approximation ck introduite au chapitre 2 (remarque : pour simplifier les notations on posera  $a(g; \vec{\kappa}(\vec{r}), \phi(\vec{r})) \equiv a(g; \vec{r})$ ) :

$$\begin{aligned}
 \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^1 dg \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{V_j} dV_j \frac{1}{l_{ij}^2} \bar{\kappa}(\vec{r}_i) a(g; \vec{r}_i) \\
 &\times \exp \left[ - \int_{l_i}^{l_j} \bar{\kappa}(\vec{r}) a(g, \vec{r}) dl \right] \bar{\kappa}(\vec{r}_j) a(g; \vec{r}_j) \left[ L_{\eta, b}(\vec{r}_j) - L_{\eta, b}(\vec{r}_i) \right] \\
 \varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^1 dg \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}}{l_{ij}^2} \bar{\kappa}(\vec{r}_i) a(g; \vec{r}_i) \\
 &\times \exp \left[ - \int_{l_i}^{l_j} \bar{\kappa}(\vec{r}) a(g, \vec{r}) dl \right] \left[ L_{\eta, b}(\vec{r}_j) - L_{\eta, b}(\vec{r}_i) \right] \\
 \varphi_{S_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^1 dg \int_{S_i} dS(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{(\vec{u} \cdot \vec{n}_i)(\vec{u} \cdot \vec{n}_j)}{l_{ij}^2} \\
 &\times \exp \left[ - \int_{l_i}^{l_j} \bar{\kappa}(\vec{r}) a(g, \vec{r}) dl \right] \left[ L_{\eta, b}(\vec{r}_j) - L_{\eta, b}(\vec{r}_i) \right]
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Au total, nous avons donc réécrit l'équation de transfert radiatif en échanges nets, en incluant une formulation en k-distribution étendue aux configurations inhomogènes. Grâce à l'écriture en différence de luminances, quelles que soient les approximations faites sur les intégrales spectrales ou géométriques, le signe des transferts sera toujours vérifié. Cette formulation est similaire à la formulation de Hottel qui sert de base à la méthode des zones. De ce fait, elle propose un découpage de l'espace (du système combustif) en zones ou mailles, le bilan radiatif pour chaque zone étant calculé à partir des puissances nettes échangées avec les autres zones (non isothermes) ; nous disposons pour ces puissances nettes d'une formulation intégrale et nous pouvons donc les estimer par la méthode de Monte Carlo.

D'un point de vue algorithmique, cela reviendra à estimer l'échange radiatif net de chaque maille avec l'ensemble des autres mailles du système au moyen de la génération aléatoire d'un nombre fini de chemins optiques aux fréquences situées dans l'infra-rouge et ayant leur origine dans cette maille.

## 4.5 Génération des rayons et choix des pdf adaptées aux variables

Nous commençons ce paragraphe en faisant quelques remarques importantes sur le vocabulaire employé. Tout d'abord, nous allons utiliser les termes de “rayons” (alors qu'il

faudrait parler de chemins optiques) et d’*“émission”*, alors que l’on raisonne en puissances nettes échangées : la logique algorithmique fera en effet apparaître un point d’origine pour la construction du rayon, et par analogie avec la méthode de Monte Carlo analogue, nous appellerons ce point *“point d’émission”* alors qu’il est autant le lieu d’absorptions que d’émission, le chemin optique correspondant étant balayé simultanément dans les deux sens, en accord avec la formulation en puissances nettes échangées.

Par ailleurs, et toujours en guise de remarque, les équations 4.25 sont écrites sous une forme symétrique pour des couples de points  $\vec{r}_i$  et  $\vec{r}_j$ , ce qui pédagogiquement permet de fixer les images importantes associées aux formulations en échanges nets. Pourtant l’algorithmique de construction du chemin optique va faire apparaître une dissymétrie. Ceci correspond à une évolution de la formulation proche de celle de l’équation 4.10 et qui sera donnée au paragraphe 4.5.5. de ce chapitre, lors d’une synthèse algorithmique sur la procédure de génération des rayons.

Les équations 4.25 laissent apparaître un certain nombre de variables qui constituent les paramètres caractéristiques des rayons. En particulier, pour définir complètement un rayon, nous avons besoin de la position de son point d’émission  $\vec{r}_i$ , de sa direction et de son sens, ainsi que de la longueur d’onde des photons transportés. En pratique, la direction et le sens seront donnés par deux angles directeurs  $\theta$ , et  $\phi$ . La longueur d’onde du rayon ne sera pas la grandeur effectivement utilisée puisque nous avons adopté une formulation en k-distribution, et nous utiliserons le coefficient d’absorption  $\kappa$  choisi dans une bande étroite de centre  $\eta$  comme variable d’intégration spectrale.

Chaque rayon émis depuis une maille sera ensuite suivi à travers le système jusqu’à son extinction. Nous estimons alors l’échange avec la maille “d’émission” et chacune des mailles traversées en choisissant pour chacune de celles-ci un point d’échange  $\vec{r}_j$ . Nous sommes donc amenés finalement à tirer pour chaque rayon :

- une direction (i.e. 2 angles directeurs  $(\theta, \phi)$ )
- un coefficient d’absorption (i.e.  $\kappa$  tiré dans une bande étroite de centre  $\eta$ , elle même choisie auparavant)
- un point d’émission  $\vec{r}_i$
- un point d’échange  $\vec{r}_j$  dans chaque maille traversée.

Chaque grandeur est générée aléatoirement en utilisant des fonctions de densités de probabilités comme expliqué précédemment (cf. paragraphe 4.1). Nous commençons dans ce qui suit par traiter les grandeurs reliées aux aspects géométriques, ce qui serait suffisant dans le traitement d’un cas monochromatique. Nous verrons notamment que la génération des positions d’émission des rayons peut se faire, selon les cas, avant ou après les tirages des angles directeurs. Cette souplesse s’appuie sur des alternatives de formulation aux équations 4.25 qui ne sont pas mises pour l’instant au premier plan, mais qui ressortiront lors de la synthèse du paragraphe 4.5.5.

## 4.5.1 Tirage des positions et direction “d’émission”

### 4.5.1.1 Emission depuis une paroi

**Position** Pour un élément de paroi  $S$ , nous choisissons de considérer tous les points comme ayant la même importance, y compris dans le cas où il existe un profil de température sur cet élément. Encore une fois, il faut considérer que le choix d’une pdf n’intervient pas sur la valeur de la solution convergée, mais uniquement sur la rapidité de la convergence. Ainsi, on reconstruira bien l’émission d’une surface non isotherme en choisissant cette pdf. Nous prenons donc un point d’émission  $P$  de façon uniforme sur la paroi de départ :

$$pdf(P) = \frac{1}{S} \quad (4.26)$$

Ceci est facilement réalisé pour des mailles de formes simples, mais demande plus de précautions dès que l’on traite des surfaces de forme quelconque provenant par exemple de logiciels de CAO. Nous allons donner l’exemple de la procédure d’échantillonnage régulier pour des surfaces de forme rectangulaire, ainsi qu’en forme de disque. Ces 2 exercices très simples permettront l’illustration de l’introduction et de l’utilisation de fonctions de densités de probabilités dans le cadre de l’intégration par la méthode de Monte Carlo.

**Surface rectangulaire** Pour une surface rectangulaire dans un repère cartésien  $(x, y)$ , nous définissons un point  $i$  par le tirage d’un couple de coordonnées  $(x_i, y_i)$ , avec  $x_i \in [x_1, x_2]$  et  $y_i \in [y_1, y_2]$ . Nous pouvons tirer indépendamment  $x_i$  et  $y_i$ , et nous utilisons des fonctions de densités de probabilités uniformes :

$$\begin{aligned} pdf(x) &= \frac{1}{\|x_2 - x_1\|} \\ pdf(y) &= \frac{1}{\|y_2 - y_1\|} \end{aligned}$$

Nous tirons deux nombres  $R_x$  et  $R_y$  entre 0 et 1 représentant respectivement les cumulatives  $cdf(x) = \int_{x_1}^x pdf(x')dx'$  et  $cdf(y) = \int_{y_1}^y pdf(y')dy'$ . On les associe aux valeurs respectivement de  $x_i$  et  $y_i$  par :

$$\begin{aligned} x_i &= x_1 + (x_2 - x_1)R_x \\ y_i &= y_1 + (y_2 - y_1)R_y \end{aligned}$$

**Surface en forme de couronne** Parmi les éléments de géométrie rencontrés dans nos exemples de mises en œuvre, nous trouverons notamment des surfaces en forme de couronne, et nous retenons ce cas pour montrer un autre exemple de tirage de position uniforme sur une surface.

Tirer un point de façon uniforme sur la surface veut dire que tous les points ont la même probabilité d’être choisis. Or quand on se place dans le cas d’une surface en forme de

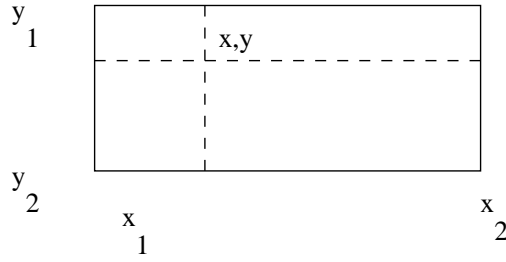


FIG. 4.2 – Tirage d'un point d'émission sur une surface : cas du rectangle

couronne, la manière la plus naturelle de choisir un point est de se placer en coordonnées cylindriques plutôt que de rester en coordonnées cartésiennes comme dans l'exemple précédent. Un point est alors repéré par le couple  $(r, \theta)$  au lieu de  $(x, y)$  précédemment. Le choix de la coordonnée angulaire ne pose pas vraiment de problème dans la mesure où la symétrie du système nous permet de faire un tirage uniforme sur les angles :

$$pdf(\theta) = \frac{1}{2\pi}$$

Par contre, si on considère une couronne de largeur  $dr$  autour de  $r \in [r_1, r_2]$ , alors cette couronne représente plus de points pour les fortes valeurs de  $r$  que pour les petites. On ne peut donc tirer  $r$  de façon uniforme entre  $r_1$  et  $r_2$  pour obtenir une distribution de points uniforme  $pdf(P) = \frac{1}{S}$  dans la couronne cylindrique délimitée par  $r_1$  et  $r_2$ .

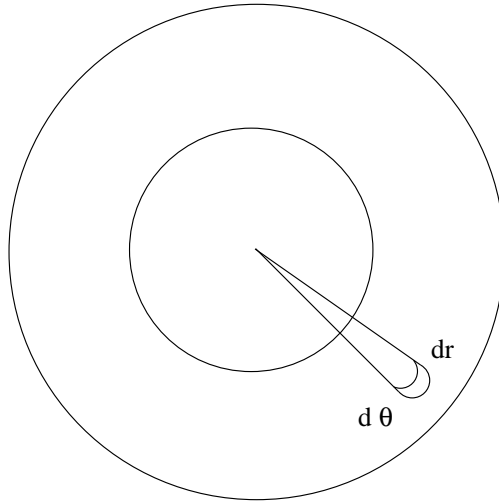


FIG. 4.3 – Tirage d'un point d'émission sur une surface : cas d'une couronne.

Pour trouver  $pdf(r)$ , nous écrivons alors :

$$pdf(P)dP = pdf(\theta)d\theta.pdf(r)dr$$

Et comme :

$$dP = r.dr.d\theta \Rightarrow pdf(r) = \frac{2\pi}{S}r$$

Tirer une valeur de  $r$  suivant  $pdf(r)$  demande de construire un générateur aléatoire à partir de la fonction de répartition correspondante. On génère donc aléatoirement une valeur de  $R_r = cdf(r) \in [0, 1]$  :

$$\begin{aligned} R_r = cdf(r) &= \int_{r_1}^r pdf(r')dr' = \int_{r_1}^r \frac{2\pi}{S}r'dr' = \frac{\pi}{S}(r^2 - r_1^2) \\ r &= \sqrt{\frac{SR_r}{\pi} + r_1^2} \end{aligned}$$

A travers ces deux exemples, on voit qu'un tirage uniforme peut se traduire par un degré de complexité différent suivant le cas auquel il s'applique et les grandeurs qui sont générées. Nous avons pu dans chacun des deux exemples établir une relation entre une réalisation de la variable aléatoire et la valeur de la cumulative tirée. Ce n'est pas toujours le cas, et il peut arriver, comme nous le verrons pour la génération de coefficients d'absorption, qu'on sache obtenir la cumulative mais pas établir cette relation.

Nous passons maintenant, toujours dans le cas d'une émission de paroi, à la génération des angles directeurs donnant l'orientation et le sens du rayon.

**Direction** Pour une surface diffuse la luminance est constante et indépendante de la direction. L'angle  $\varphi$  est tiré de façon uniforme sur  $[0, 2\pi]$ , tandis que par respect de la loi en cosinus de Lambert [Cherkaoui, 1993], la densité de probabilité de  $\theta$ ,  $p(\theta)$  prend les valeurs suivantes sur  $[0, \frac{\pi}{2}]$  :

$$p(\theta) = 2 \sin \theta \cos \theta$$

D'où :

$$R_\theta = \int_0^\theta 2 \sin \theta' \cos \theta' d\theta' = \sin^2 \theta \Rightarrow \theta = \text{Arcsin}(\sqrt{R_\theta})$$

#### 4.5.1.2 Emission par le gaz

Nous ne reviendrons pas sur les difficultés éventuelles de génération des positions dans une maille de forme quelconque. Nous pouvons juste mentionner que le problème ne va pas en se simplifiant par rapport à une émission surfacique, puisque nous avons désormais une dimension supplémentaire. En effet, à ce stade nous considérons des volumes délimités par des enveloppes de forme quelconque, et la génération d'un point de façon uniforme à l'intérieur de celui-ci est un problème complexe ; ce travail n'a pas été le nôtre.

Par contre, nous pouvons faire quelques constatations particulières liées à la présence d'un milieu participant pour le choix d'un point d'émission dans un volume. Un rayon servira à estimer l'échange entre la maille d'émission et le reste du système uniquement si le

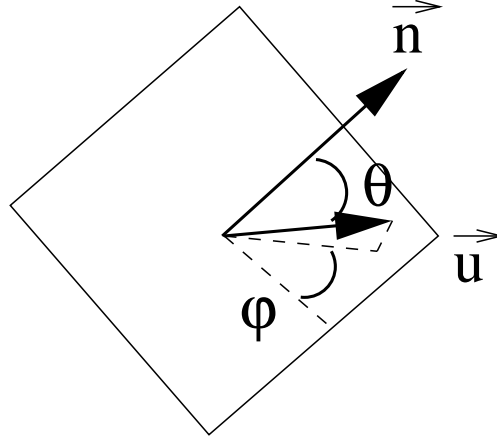


FIG. 4.4 – Tirage d'une direction d'émission sur une surface quelconque.

rayonnement émis n'est pas entièrement réabsorbé avant de sortir de la maille d'émission. A cause de ce phénomène de réabsorption, les algorithmes classiques de Monte Carlo ne convergent pas en milieu optiquement épais. La génération du point d'émission doit donc tenir compte de l'épaisseur optique de la maille, qui est la variable fondamentale dans ce cas. Dans un cas monodimensionnel, de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001] a proposé de générer le point d'émission à partir de l'enveloppe de maille. On commence dans ce cas par définir un point sur l'enveloppe qui sera le point de sortie du rayon. L'orientation du rayon est ensuite donnée par le tirage du couple d'angles directeurs  $(\theta, \phi)$ . Cela définit un segment  $l$  sur lequel peut se trouver le point d'émission dans la maille. Alors, tirer un point

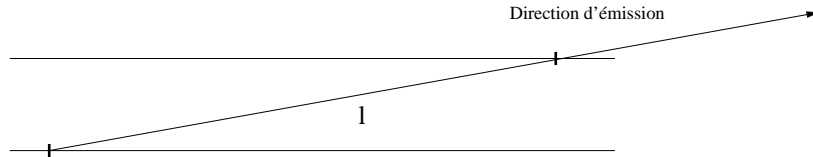


FIG. 4.5 – Génération d'un rayon à partir de l'enveloppe de la maille dans un cas monodimensionnel.

d'émission revient à tirer une abscisse curviligne  $\sigma$  sur  $l$ . La pdf employée dans ce cas tient compte de l'atténuation exponentielle du rayonnement :

$$p(\sigma) = \frac{\kappa \exp(-\kappa \sigma)}{1 - \exp(-\kappa l)} \quad (4.27)$$

On peut remarquer que, à la limite mince, cette pdf distribue uniformément la position d'émission sur le segment défini dans la maille d'émission par la direction du rayon sortant, et qu'à la limite épaisse elle se traduit par l'émission d'une surface opaque.

Dans cet algorithme proposé dans un cas monodimensionnel, le tirage du point d'émission est lié aux générations angulaires (en particulier de l'angle  $\theta$ ) par la longueur  $l$  ( $l$  est déterminée dès que les angles ont été générés). De plus, on sait que dans le cas d'une épaisseur optique forte, le comportement émissif d'une couche de gaz se rapproche de celui d'une surface opaque. Une génération angulaire d'après la loi de Lambert est donc adaptée à partir de la surface de la maille. D'autre part, dans le cas des faibles épaisseurs optiques, le tirage des directions doit se faire de façon isotrope. L'algorithme proposé par de Lataillade utilise une composition des tirages respectivement isotrope, et selon la loi de Lambert pour donner une pdf de tirage angulaire qui peut passer continuellement d'un de ces cas extrêmes à l'autre [de Guilhem de Lataillade, 2001]. Cela n'a été possible que parce que la donnée du couple angulaire  $(\theta, \phi)$  donne directement la longueur  $l$ .

Considérons maintenant un cas multidimensionnel. Alors, la figure 4.6 montre que pour un couple donné  $(\theta, \phi)$ , la longueur possible d'un rayon dans la maille n'est pas constante suivant le point choisi sur l'enveloppe comme point de sortie du rayon de la maille.

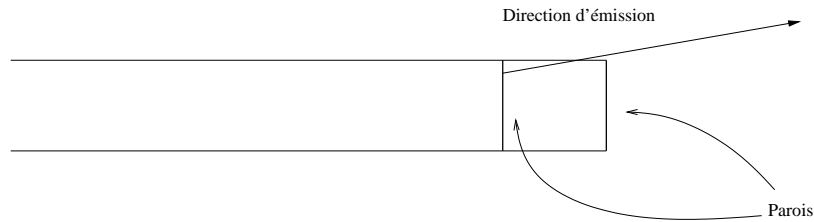


FIG. 4.6 – Inadéquation de l'algorithme 1D à un cas multi-D.

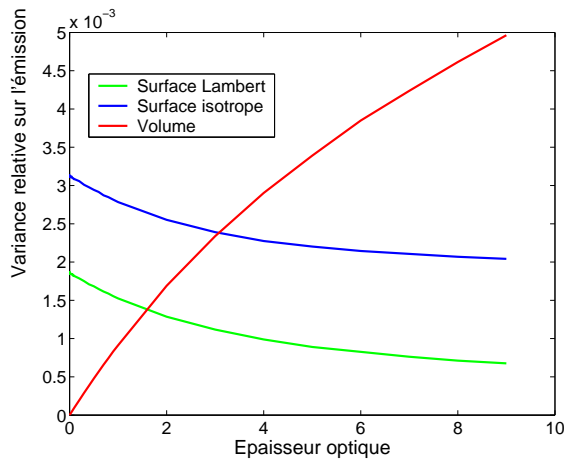
Cela nous amène à remettre en cause la génération systématique des positions d'émission à partir de la surface de la maille. Cependant, dans le cas des fortes épaisseurs optiques, les points d'émission sont localisés près de l'enveloppe de la maille, et nous pouvons donc continuer à bénéficier de l'algorithme de de Lataillade qui permet de résoudre le problème de la convergence de la méthode de Monte Carlo en milieu épais.

Pour déterminer une procédure de génération des points d'émission dans le cas de mailles volumiques multidimensionnelles, nous faisons un exercice simple où nous étudions l'émission d'un parallélépipède isotherme (Fig. 4.7(a)) <sup>6</sup>. Nous testons la génération des rayons depuis les parois, d'une part avec un tirage directionnel en cosinus suivant la loi de Lambert (légende *Surface Lambert* sur la figure 4.7), d'autre part avec un tirage isotrope (légende *Surface isotrope*), testant ainsi les deux cas précédemment évoqués pour les mailles monodimensionnelles. Nous ajoutons à cela une génération uniforme du point d'émission dans le volume avec un tirage isotrope des directions des rayons sortants (légende *volume*). Nous affichons pour les 3 cas l'écart relatif à la solution trouvée en fonction de l'épaisseur optique <sup>7</sup>.

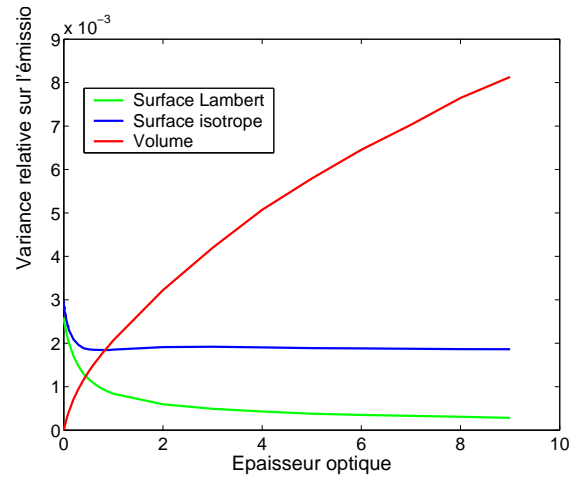
La figure 4.7(a) montre qu'il est plus avantageux pour cette géométrie de distribuer les points d'absorption uniformément dans le volume pour une épaisseur optique inférieure à

<sup>6</sup>L'émission que nous calculons ici est le rayonnement sortant du cube isotherme.

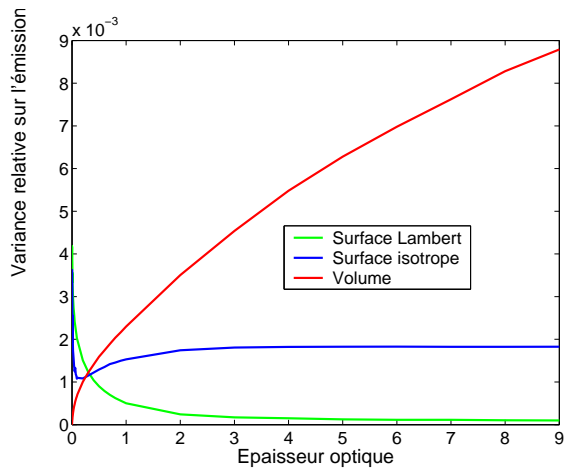
<sup>7</sup>Nous prenons comme épaisseur optique  $\kappa L$ ,  $L$  étant la dimension du côté du cube



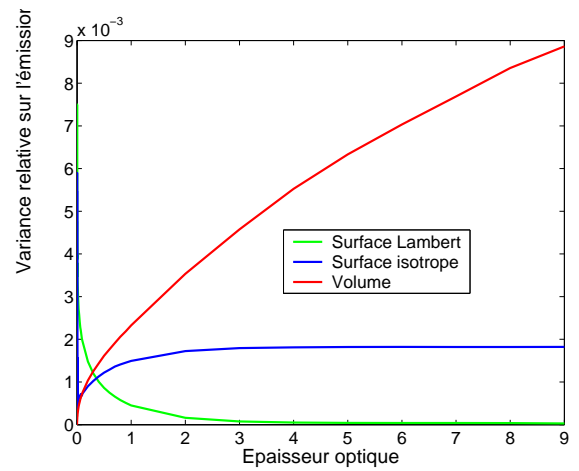
(a) Emission d'un cube.



(b) Emission d'un parallélépipède aplati avec un rapport 1/10 entre la dimension la plus petite et les autres.



(c) Emission d'un parallélépipède aplati avec un rapport 1/100 entre la dimension la plus petite et les autres.



(d) Emission d'un parallélépipède aplati avec un rapport 1/1000 entre la dimension la plus petite et les autres.

FIG. 4.7 – Influence de la procédure de génération d'un point d'émission en fonction de l'épaisseur optique pour différentes géométries.



$\approx 1$ , et que la génération à partir des bords, avec un tirage des directions en  $\cos \theta$  suivant la loi de Lambert converge plus rapidement dans le cas contraire.

Nous déformons maintenant notre cube en l’aplatissant progressivement dans une dimension. L’épaisseur optique est ici estimée par  $\kappa L_{min}$  où  $L_{min}$  est la plus petite dimension. On observe l’évolution des précisions relatives pour chaque manière de tirer un point d’émission, au fur et à mesure que le cube se déforme pour tendre vers une situation de plans parallèles<sup>8</sup>. Dans toutes les situations, il paraît important de choisir un tirage uniforme en volume pour les faibles épaisseurs optiques et un tirage à partir des bords pour les épaisseurs optiques plus fortes. Bien que l’épaisseur optique intermédiaire soit fonction des dimensions relatives, le point de croisement se situe toujours près de 1, et nous choisirons cette valeur comme seuil pour basculer d’un mode de tirage à l’autre.

**Position et direction** Les deux façons de choisir la position d’émission que nous avons retenues correspondent aussi à deux façons bien distinctes de choisir la direction.

–  $\kappa L_{min} < 1$  :

Dans le cas où l’épaisseur optique estimée est inférieure à l’unité, la position d’émission est choisie uniformément dans le volume

$$pdf(P) = \frac{1}{V}$$

et on génère la direction ensuite. Cette direction est générée à partir des deux angles directeurs  $\theta$  et  $\phi$  autour d’une normale  $\vec{n}$  quelconque (Fig. 4.8(a)).  $\phi$  est d’abord tiré uniformément sur  $[0, 2\pi]$  :

$$pdf(\phi) = \frac{1}{2\pi}$$

Ensuite, une émission isotrope signifie que l’énergie rayonnée se distribue uniformément sur la sphère unité. On en déduit :

$$pdf(\theta)d\theta = \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \sin \theta d\theta$$

Soit :

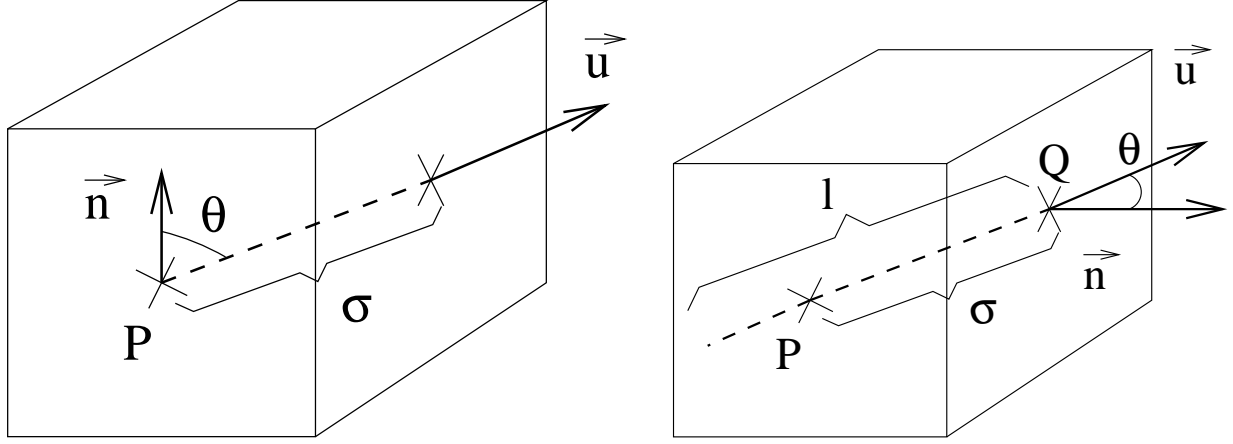
$$pdf(\theta) = \frac{1}{2} \sin \theta$$

L’angle  $\theta$  prend ici des valeurs sur  $[0, \pi]$ , et la génération aléatoire se fait classiquement selon :

$$R_\theta = \int_0^\theta \frac{1}{2} \sin \theta d\theta = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \Rightarrow \theta = \arccos(1 - 2R_\theta)$$

---

<sup>8</sup>Pour la dernière courbe 4.7(d), le rapport entre la plus petite dimension et les autres est de 1000. On est donc quasiment en situation d’émission d’une couche monodimensionnelle, où le paramètre géométrique important est bien l’épaisseur de la couche



(a) Tirage d'une direction isotrope dans une maille de volume  $V$ .

(b) Tirage d'une direction à partir du bord pour une maille de volume  $V$  et d'enveloppe  $S_V$ .

FIG. 4.8 – Tirage d'une direction d'émission dans un volume.

–  $\kappa L_{min} > 1$  :

Si par contre, on fait le choix de l'algorithme associé à la pdf décrite par l'équation 4.27, il faut d'abord choisir un point  $Q$  de façon uniforme sur l'enveloppe de la maille. Ce point sera le point de sortie du rayon dans la maille et fixe donc une normale sortante  $\vec{n}$ . La direction est ensuite donnée par le tirage du couple d'angles directeurs  $(\theta, \phi)$  autour de  $\vec{n}$  (Fig. 4.8(b))<sup>9</sup>, avant de fixer la position  $P$  d'émission du rayon à travers l'abscisse curviligne  $\sigma$ . On inverse donc les tirages angulaires et le tirage du point d'émission par rapport au cas mince.

$$\begin{aligned}
 pdf(Q) &= \frac{1}{S_V} \\
 pdf(\phi) &= \frac{1}{2\pi} \\
 pdf(\theta) &= 2 \sin \theta \cos \theta \\
 pdf(\sigma) &= \frac{\kappa \exp(-\kappa \sigma)}{1 - \exp(-\kappa l)}
 \end{aligned}$$

Cet algorithme a été choisi pour améliorer les qualités de convergence dans le cas où l'on rencontre de fortes épaisseurs optiques. Le tirage de la direction se fait à partir du point  $Q$  défini sur l'enveloppe, comme si on tirait depuis une surface noire, et donc en respectant la loi de Lambert. De plus, à forte épaisseur optique  $pdf(\sigma)$  assure que la majorité des rayons provient de la région frontalière de l'enveloppe de la maille et, au total, le comportement émissif simulé tend bien vers celui d'une surface opaque noire.

<sup>9</sup>  $\phi \in [0, 2\pi]$  et  $\theta \in [0, \pi/2]$

### 4.5.2 Positions d'échange

Une fois le rayon orienté et le point d'émission choisi, nous le suivons jusqu'à son extinction à travers chaque maille traversée, et calculons l'échange de la maille d'émission avec celle-ci. Le point d'échange pour chaque maille est défini sur le trajet optique du rayon dans cette maille (en l'occurrence juste un segment de droite en l'absence de diffusion). De la même façon que pour la position d'émission, nous utilisons une pdf tenant compte de l'épaisseur optique de la maille traversée (Eq. 4.27). En effet, si on traverse une maille de forte épaisseur optique, l'essentiel des échanges se fait en bord de maille.

Nous passons à présent aux optimisations utilisées pour le tirage des grandeurs spectrales : la bande étroite et le coefficient d'absorption. Cependant, nous ne nous étendrons pas sur cette partie dans la mesure où nous reprenons les choix effectués dans la thèse de de Lataillade[de Guilhem de Lataillade, 2001].

### 4.5.3 Bandes étroites

Le spectre étant découpé en bandes étroites de même largeur (pour nous  $25\text{cm}^{-1}$ ), nous devons pour chaque rayon définir dans quelle bande (i.e. dans quel intervalle spectral) nous irons ensuite générer un coefficient d'absorption pour chaque espèce rayonnante. Le spectre des gaz étant très complexe dans le domaine infra-rouge, il existe des bandes spectrales pour lesquelles les espèces rayonnantes présentent un grand nombre de transitions, et d'autres où il ne se produit aucune absorption ou émission. Un tirage uniforme de chaque bande conduirait donc à effectuer des calculs pour des parties du spectre qui n'interviennent pas dans l'estimation des échanges. Il faut par conséquent trouver un moyen d'évaluer la part de chaque bande spectrale dans l'échange total de la maille d'émission avec le reste du système.

Le rayonnement émis depuis une maille de gaz va contribuer à l'échange de cette maille avec les autres mailles de gaz, ainsi qu'avec les parois. Nous utilisons une pondération composée par un terme représentatif de l'émission de la maille dans une bande étroite, et par une partie énergétique :

$$F = [1 - \bar{\tau}(l)] \max \Delta \bar{L}_b \quad (4.28)$$

où  $\bar{\tau}(l)$  est la transmittivité moyenne de la maille d'émission, pour une bande étroite, sur une distance caractéristique  $l$  (dimension de la maille d'émission). La partie énergétique  $\max \Delta \bar{L}_b$  est la différence maximum de luminance noire entre le point d'émission et le reste du système. Une pondération différente a été utilisée par Cherkaoui [Cherkaoui et al., 1996] et Clergent [Clergent, 2000] faisant intervenir la dérivée partielle de la luminance noire au point d'émission. En raison des différences de température importantes que l'on peut trouver dans les systèmes de combustion, cette pondération n'est pas utilisable dans les configurations auxquelles nous pourrions être confrontés.

Le rayonnement émis depuis une paroi participe à l'échange entre cette paroi et le volume de gaz confiné dans le système. Nous représentons alors l'absorption par le gaz du rayonnement émis par  $[1 - \bar{\tau}(l)]$ , où  $l$  est cette fois la dimension caractéristique du système entier.

Nous conservons la même expression pour la partie énergétique, ce qui finalement laisse inchangée la pondération d'une bande (Eq. 4.28), dans le cas d'une émission de paroi.

La pondération que nous avons choisie est ensuite utilisée pour définir une probabilité de tirage pour chaque bande étroite  $n$  :

$$p_n = \frac{F_n}{\sum_{n=1}^{n_b} F_n} \quad (4.29)$$

Cette pondération optimise les tirages de bandes pour les échanges de type gaz-gaz ou gaz-paroi. Par contre, elle n'est pas pensée pour l'optimisation des échanges de type paroi-paroi. Cela ne représente pas une grosse limitation dans la mesure où l'on sait que dans les systèmes de combustion, les parois sont approximativement à la même température. Elles n'échangent donc pas entre elles de manière importante. Nous avons cependant toujours la possibilité de changer cette pondération dans le cas où le système présenterait de fortes disparités au niveau des températures de paroi.

#### 4.5.4 Coefficients d'absorption

En appliquant une transformée inverse de Laplace à l'expression de la transmittivité moyenne d'une colonne de gaz pour un modèle statistique à bandes étroites de Malkmus (Eq. 4.19), on obtient la fonction de distribution des coefficients d'absorption  $f(\kappa)$  :

$$f(\kappa) = \mathcal{L}^{-1}[\bar{\tau}(l)] = \sqrt{\frac{\phi \bar{\kappa}}{2\pi \kappa^3}} \exp \left[ -\frac{\phi}{2} \frac{(\kappa - \bar{\kappa})^2}{\kappa \bar{\kappa}} \right]$$

Cette distribution a la forme d'une distribution inverse gaussienne de moyenne  $\bar{\kappa}$  et de paramètre de forme  $\phi$  [Chhikara and Folks, 1989], dont nous pouvons utiliser les propriétés mathématiques pour générer les coefficients d'absorption à partir des fonctions  $f(\kappa)$  [Dufresne et al., 1999].

Nous avons vu qu'il est important de pouvoir calculer la cumulative d'une distribution pour pouvoir créer un générateur aléatoire à partir de celle-ci. La cumulative d'une inverse gaussienne  $f(\kappa; \bar{\kappa}, \phi)$ <sup>10</sup> s'exprime par :

$$\int_0^\kappa f(\kappa'; \bar{\kappa}, \phi) d\kappa' = \Gamma \left[ -\sqrt{\frac{\phi}{\kappa/\bar{\kappa}}} \left( 1 - \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} \right) \right] + e^{2\phi} \Gamma \left[ -\sqrt{\frac{\phi}{\kappa/\bar{\kappa}}} \left( 1 + \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} \right) \right]$$

Comme on ne sait pas inverser analytiquement cette fonction pour extraire une valeur du coefficient d'absorption  $\kappa$  on utilise un moyen détourné.

---

<sup>10</sup>  $f(\kappa; \bar{\kappa}, \phi)$  désigne une fonction de  $\kappa$ , de forme inverse gaussienne, de valeur moyenne  $\bar{\kappa}$ , et de paramètre de forme  $\phi$ . La notation  $f(\kappa)$  pourra être considérée comme l'équivalent de  $f(\kappa; \bar{\kappa}, \phi)$  dans tout le document du fait des conventions utilisées.

On se sert de l'algorithme de Michael [Michael et al., 1976] pour générer une variable aléatoire  $X$  à partir d'une distribution inverse gaussienne de valeur moyenne  $\bar{\kappa}$ , et de paramètre de forme  $\phi$ . Cet algorithme à deux passes consiste d'abord à tirer une valeur  $x_1$  en suivant une distribution du  $\chi^2$  à un degré de liberté. Elle sert ensuite à établir une deuxième valeur  $x_2$  :

$$x_2 = a \left( 1 + \frac{x_1}{2\phi} - \sqrt{\frac{x_1}{\phi} + \left( \frac{x_1}{2\phi} \right)^2} \right)$$

On effectue alors un test de Bernoulli et on retient  $\kappa = x_2$  avec une probabilité  $P = \frac{\bar{\kappa}}{(\bar{\kappa} + x_2)}$ , et  $\kappa = \frac{\bar{\kappa}^2}{x_2}$  avec une probabilité  $1 - P$ .

En fait, le problème concret se traduit par l'utilisation, non pas de  $f(\kappa)$  comme densité de probabilité, mais des fonctions  $f^{ss}$ ,  $f^{gs}$ , et  $f^{gg}$  qui apparaissent quand on écrit l'échange entre respectivement deux surfaces, une maille de gaz et une surface, et entre deux mailles de gaz. Ces trois pdf's sont fonctions de la transmittivité moyenne, de sa dérivée première, ou de sa dérivée seconde :

$$\begin{aligned} f^{ss}(\kappa; l) &= \frac{1}{\bar{\tau}(l)} \exp(-\kappa l) f(\kappa) \\ f^{gs}(\kappa; l) &= \frac{-1}{\frac{\partial \bar{\tau}}{\partial l}(l)} \kappa \exp(-\kappa l) f(\kappa) \\ f^{gg}(\kappa; l) &= \frac{1}{\frac{\partial^2 \bar{\tau}}{\partial l^2}(l)} \kappa^2 \exp(-\kappa l) f(\kappa) \end{aligned}$$

L'utilisation de ces trois pdf's se fait grâce aux propriétés de normalisation et de changement de variable des distributions inverses gaussiennes, qui permettent justement de les ramener à une forme d'inverse gaussienne. Si on sait exprimer la distribution d'une variable  $X$  au moyen d'une inverse gaussienne de valeur moyenne  $\bar{\kappa}$ , et de facteur de forme  $\phi$ , alors on peut donner la fonction de densité de probabilité  $\mathcal{R}$  de  $Y = \frac{1}{X}$  :

$$pdf(y) = \mathcal{R}(y; \bar{\kappa}, \phi) = \bar{\kappa} y \mathcal{F}\left(y; \frac{1}{\bar{\kappa}}, \phi\right)$$

Ce qui permet de réécrire  $f^{ss}$ ,  $f^{gs}$  et  $f^{gg}$  :

$$\begin{aligned} f^{ss}(\kappa; l) &= \mathcal{F}(\kappa; \bar{\kappa}^*(l), \phi^*(l)) \\ f^{gs}(\kappa; l) &= \mathcal{R}\left(\kappa; \frac{1}{\bar{\kappa}^*(l)}, \phi^*(l)\right) \\ f^{gg}(\kappa; l) &= \frac{1}{(\bar{\kappa}^*)^2} \left(1 + \frac{1}{\phi^*(l)}\right)^{-1} \kappa^2 \mathcal{F}(\kappa; \bar{\kappa}^*(l), \phi^*(l)) \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}\bar{\kappa}^*(l) &= \bar{\kappa} \left(1 + \frac{2\bar{\kappa}l}{\phi}\right)^{-\frac{1}{2}} \\ \phi^*(l) &= \phi \left(1 + \frac{2\bar{\kappa}l}{\phi}\right)^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

Pour l'estimation de l'échange entre une maille de gaz (de dimension caractéristique  $L$ ) et une surface (située à une distance  $l$ ), le volume de gaz émetteur peut être considéré comme épais ou non. Dans le cas où l'épaisseur optique de la maille de gaz émettrice est grande, elle tend vers le comportement en émission d'une surface. Pour cette raison, on utilise dans ce cas une composition entre  $f^{ss}$  et  $f^{gs}$  pour guider le tirage du coefficient d'absorption :

$$pdf(\kappa) = \alpha f^{gs}(\kappa) + (1 - \alpha) f^{ss}(\kappa) \quad (4.30)$$

où  $\alpha$  est un coefficient de pondération mince/épais. Quand  $\alpha = 1$  on est à la limite mince et quand  $\alpha = 0$  à la limite épaisse où le volume de gaz se comporte en émission comme une surface. L'expression de  $\alpha$  donnée ci-dessous a été établie dans le même esprit que celui qui a mené à l'expression de la pondération des bandes, c'est à dire en considérant une couche de gaz échangeant avec tout le système, et des parois échangeant essentiellement avec les volumes de gaz :

$$\alpha = \frac{\bar{\tau}(l)g^{ss}(\kappa_c; l) - \bar{\tau}(l+L)g^{ss}(\kappa_c; l+L)}{\bar{\tau}(l) - \bar{\tau}(l+L)} \quad (4.31)$$

où  $\kappa_c$  est un coefficient d'absorption critique vérifiant  $\kappa_c L = 1$ .

Tous les détails pour le calcul de  $\alpha$  peuvent être trouvées dans [de Guilhem de Lataillade, 2001].

#### 4.5.5 Synthèse sur la procédure de génération des rayons

Après ces développements mathématiques, nous souhaitons donner une vision concrète de l'utilisation de la démarche explicitée, en faisant apparaître les quantités numériquement évaluées du fait de l'utilisation des pdf's. Nous retenons pour cela le cas de la génération d'un rayon dans l'évaluation de l'échange net entre un élément de volume et une paroi noire (Fig. 4.9). En partant de l'ETR écrite en puissances nettes échangées, nous déterminons les pdf's utilisées pour générer chaque variable aléatoire. Nous avons établi une formulation en échanges nets sous la forme d'intégrales multiples (Eqs. 4.24). Chaque intégrale de cette formulation peut se mettre sous la forme :

$$I_x = \int_{D_x} pdf(x) \omega_x dx \quad (4.32)$$

où  $I_x$  représente une intégrale sur la variable  $x$  définie dans le domaine  $D_x$ . Nous donnons à chaque étape l'expression de  $\omega = \prod_x \omega_x$ , que nous désignons par le terme d'intégrand et dont nous ferons la moyenne sur un grand nombre de rayons pour estimer l'intégrale multiple représentant cet échange radiatif (cf. paragraphe 4.1 concernant le principe de l'intégration

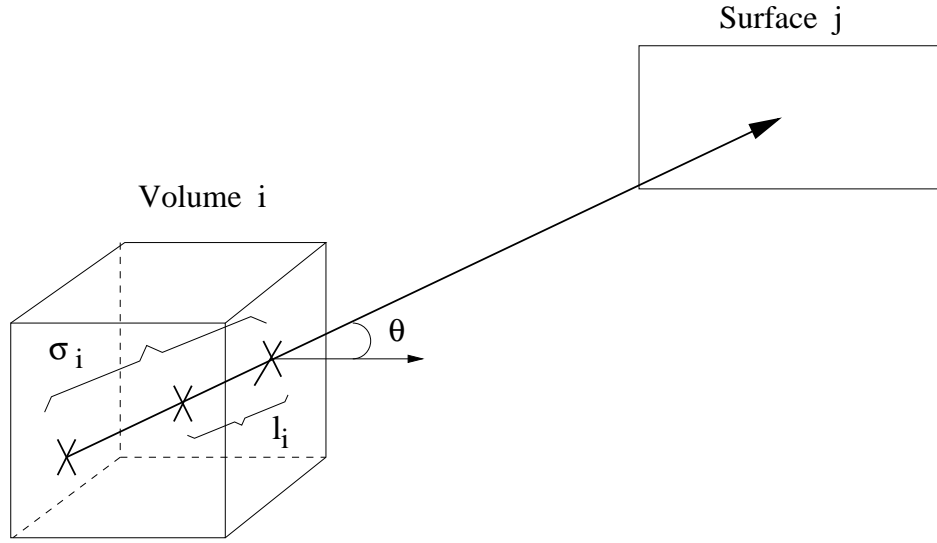


FIG. 4.9 – Echange entre un volume et une surface. Exemple d'évaluation d'un échange par la méthode de Monte Carlo.

par la méthode de Monte Carlo).

Nous commençons par détailler l'ensemble de la démarche dans un milieu aux propriétés homogènes, puis nous commenterons de façon séparée sa généralisation à des milieux inhomogènes et à des surfaces réfléchissantes.

Nous écrivons d'abord l'expression de l'intégrale que nous cherchons à évaluer et qui constitue notre base de travail. Comme nous avons choisi un échange entre un volume et une surface, nous prenons l'expression  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j}$  :

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} = \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^\infty f(\kappa) d\kappa \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}}{l_{ij}^2} \kappa \exp[-\kappa l_{ij}] \left[ L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i) \right] \quad (4.33)$$

Comme dans la suite de l'exemple nous faisons l'hypothèse que nous obtenons une épaisseur optique entraînant un choix de tirage à partir des bords de la maille d'émission, nous faisons l'exercice supplémentaire de procéder à une modification de cette équation. Nous remplaçons l'intégration sur le volume d'émission par une intégration sur la surface de celui-ci et sur la direction du rayon.

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} = \sum_{n=1}^{n_b} \Delta \eta_n \int_0^\infty f(\kappa) d\kappa \int_{S_{V_i}} dS_{V_i} \int_{2\pi} d\Omega \int_{\sigma_i} dl \cos \theta \quad \kappa \tau_i \tau_{i \rightarrow j} \Delta L \quad V(i, j) \quad (4.34)$$

Nous avons introduit de nouvelles notations pour cet exemple :  $S_{V_i}$  désigne ici la surface entourant le volume  $V_i$ ,  $\tau_i$  la transmittivité entre le point d'émission et le point de sortie dans

$V_i$ ,  $\tau_{i \rightarrow j}$  la transmittivité entre le point de sortie de  $V_i$  et le point d'absorption sur la surface  $S_j$ , et  $\Delta L$  la différence de luminance noire entre le point d'émission et le point d'absorption.  $V(i, j)$  est une fonction de visibilité qui vaut 1 si le rayon défini correspond effectivement à un chemin optique reliant les mailles  $i$  et  $j$ , et 0 sinon.

Nous faisons ensuite apparaître dans cette équation une expression générale des fonctions de densité de probabilité et de  $\omega$  :

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} = \sum_{n=1}^{n_b} p_n \int_0^\infty pdf(\kappa) d\kappa \int_{S_{V_i}} pdf(S_{V_i}) dS_{V_i} \cos \theta \int_{2\pi} pdf(\Omega) d\Omega \int_{\sigma_i} pdf(l_i) dl_i \times \omega$$

avec

$$\omega = \frac{\Delta \eta_n \kappa \tau_i \tau_{i \rightarrow j} \Delta L \cos \theta f(\kappa)}{p_n pdf(\kappa) pdf(S_{V_i}) pdf(\Omega) pdf(l_i)} V(i, j)$$

Cette expression sera toujours vraie dans ce contexte quelles que soient les pdf's utilisées. Nous passons maintenant aux expressions littérales utilisées.

Dans l'ordre des intégrales, nous résolvons d'abord celle liée à la dimension spectrale : nous avons besoin d'une valeur de l'épaisseur optique pour choisir le mode de tirage de la position d'émission dans le volume. Nous commençons donc par choisir pour le rayon courant une bande étroite avec une probabilité discrète  $p_n$  (équation 4.29).

**Bande étroite** Le tirage d'une bande étroite se fait par l'utilisation d'une probabilité discrète  $p_n$ , puisque les bandes sont dénombrables. Nous ne nous attardons pas sur cette première génération dans la mesure où elle ne présente aucune difficulté, et nous écrivons la contribution  $\omega_n$  à  $\omega$  venant du tirage de la bande

$$\omega_n = \frac{1}{p_n} = \frac{\sum_{n=1}^{n_b} F_n}{F_n}$$

Nous générons maintenant un coefficient d'absorption dans la bande  $n$  que nous venons de choisir.

**Coefficient d'absorption** Nous utilisons la fonction de densité de probabilité définie dans le paragraphe précédent (équation 4.30). En utilisant les expressions de  $f^{gs}(\kappa)$  et de  $f^{ss}(\kappa)$  de [Dufresne et al., 1999], on aboutit à :

$$pdf(\kappa) = \alpha \frac{\kappa \exp[-\kappa l] f(\kappa)}{\bar{\kappa} \left(1 + \frac{2\bar{\kappa} l}{\phi}\right)^{-1/2} \bar{\tau}(l)} + (1 - \alpha) \frac{\exp[-\kappa l] f(\kappa)}{\bar{\tau}(l)}$$

la longueur  $l$  étant la distance entre le volume d'émission  $V_i$  et la paroi  $S_j$ . Nous utilisons l'expression de  $\alpha$  pour  $l = 0$  car les rayons générés pour une maille servent à évaluer l'échange net de la maille avec l'ensemble du reste du système (qui est au contact de la maille d'émission).



et donc  $l = 0$ ) et ne sont pas dédiés à la seule évaluation de l'échange net avec une maille distincte. Du reste, à ce stade de l'algorithme, nous ne savons pas encore dans quelle direction et par où va passer le rayon. Avec ce choix, les termes en exponentielle dans l'expression de  $pdf(\kappa)$  sont tous égaux à 1, et on obtient :

$$pdf(\kappa) = \alpha \frac{\kappa f(\kappa)}{\bar{\kappa}} + (1 - \alpha) \frac{f(\kappa)}{1}$$

et la contribution à  $\omega$  associée au tirage de  $\kappa$  est :

$$\omega_\kappa = \frac{1}{\left[\alpha \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} + (1 - \alpha)\right] f(\kappa)} = \frac{1}{pdf(\kappa)}$$

Nous remplaçons cette expression dans celle de l'intégrant  $\omega$ , ce qui donne :

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{\sum_{n=1}^{n_b} F_n \Delta \eta_n \kappa \tau_{i \rightarrow j} \Delta L \cos \theta f(\kappa)}{F_n \left[\alpha \frac{\kappa f(\kappa)}{\bar{\kappa}} + (1 - \alpha) f(\kappa)\right] pdf(S_{V_i}) pdf(\Omega) pdf(l_i)} V(i, j) \\ &= \frac{\sum_{n=1}^{n_b} F_n \Delta \eta_n \kappa \tau_{i \rightarrow j} \Delta L \cos \theta}{F_n \left[\alpha \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} + (1 - \alpha)\right] pdf(S_{V_i}) pdf(\Omega) pdf(l_i)} V(i, j) \end{aligned}$$

Nous disposons maintenant de la valeur du coefficient d'absorption  $\kappa$  pour le rayon courant. Comme  $\kappa$  est connu, nous pouvons aborder la partie géométrique de l'algorithme. En particulier, la valeur de  $\kappa L$  ( $L$  étant la dimension caractéristique de la maille d'émission) nous permet de choisir l'algorithme de tirage des positions d'émission, ainsi que l'algorithme de génération angulaire (cf. paragraphe 4.5.1.2). Comme annoncé précédemment, à titre d'exemple, nous supposons dans ce qui suit que  $\kappa L > 1$  pour le rayon courant. Nous adoptons par conséquent une procédure de génération de la position d'émission à partir de l'enveloppe de la maille, et un tirage angulaire suivant la loi de Lambert.

**Surface** Nous choisissons un point de façon uniforme sur  $S_{V_i}$ . Il se peut donc dans le cas d'une maille délimitée par des plans (polyèdre) qu'on soit amené à faire un premier tirage pour choisir sur lequel de ces plans nous tirons notre point de sortie. Ceci se fait proportionnellement à la surface de chaque plan et n'intervient par dans le calcul de  $\omega$ . Nous écrivons donc directement :

$$pdf(S_{V_i}) = \frac{1}{S_{V_i}}$$

Et l'expression de  $\omega$  à ce stade fait donc apparaître la surface enveloppant la maille émettrice :

$$\omega = \frac{\sum_{n=1}^{n_b} F_n \Delta \eta_n S_{V_i} \kappa \tau_{i \rightarrow j} \Delta L \cos \theta}{F_n \left[\alpha \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} + (1 - \alpha)\right] pdf(\Omega) pdf(l_i)} V(i, j)$$

Nous allons à présent définir la direction du rayon passant par ce point par rapport à la normale à la surface de sortie en ce point.

**Angles** Conformément au choix fait dans cet exemple ( $\kappa L > 1$ ), nous générons l'angle  $\theta$  suivant la loi de Lambert, et l'angle  $\phi$  de façon uniforme.

$$pdf(\Omega) = \frac{\cos \theta}{\pi}$$

L'utilisation de cette pdf introduit un terme  $\pi$  dans  $\omega$ , dans lequel nous retrouvons donc une expression de la différence d'émittance  $\pi \Delta L = \Delta M$  :

$$\omega = \frac{\sum_{n=1}^{n_b} F_n \Delta \eta_n S_{V_i} \kappa \tau_i \tau_{i \rightarrow j} \pi \Delta L}{F_n [\alpha \frac{\kappa}{\kappa} + (1 - \alpha)] pdf(l_i)} V(i, j)$$

Le rayon est maintenant complètement défini à l'exception du point d'émission qui peut être choisi le long du segment  $\sigma_i$  dans le volume  $V_i$ .

**Point d'émission** Nous utilisons une pdf tenant compte de l'atténuation exponentielle du rayonnement (Eq. 4.27) :

$$pdf(l_i) = \frac{\kappa \exp[-\kappa l_i]}{1 - \exp[-\kappa \sigma_i]}$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{\sum_{n=1}^{n_b} F_n \Delta \eta_n S_{V_i} (1 - \exp[-\kappa \sigma_i]) \tau_{i \rightarrow j} \pi \Delta L}{F_n [\alpha \frac{\kappa}{\kappa} + (1 - \alpha)]} V(i, j)$$

Ce qui signifie que nous tirons la position d'émission uniquement pour pouvoir calculer la valeur de la luminance en ce point, la longueur parcourue par le rayon dans le volume d'émission n'intervenant pas dans la grandeur calculée pour estimer l'échange  $\omega$ . Par contre, les longueurs dans les mailles traversées jusqu'à l'extinction du rayon interviennent directement dans le calcul de  $\omega$  par l'intermédiaire de  $\tau_{i \rightarrow j} = \prod_m \exp[-\kappa \sigma_m]$  <sup>11</sup>.

A ce moment, nous avons complètement déterminé la valeur de l'intégrant  $\omega$  pour un rayon donné, et la fonction de visibilité  $V(i, j)$  assure que  $\omega$  est nul pour un rayon donné émis de la maille  $i$  s'il n'atteint pas la maille  $j$ . Tous les raisonnements ont été menés sur un seul rayon. L'échange net  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j}$  est estimé en faisant la moyenne de la valeur de l'intégrant (recalculé à chaque fois) sur un grand nombre  $N$  de rayons :

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} \approx \langle \omega \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \omega$$

Et l'erreur statistique sur cette valeur est donnée par :

$$\sigma(\langle \omega \rangle_N) \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{[\langle \omega^2 \rangle_N - \langle \omega \rangle_N^2]}$$

<sup>11</sup>Où  $m$  est un indice identifiant chaque maille traversée

**Généralisation** En pratique, on ne calcule pas séparément un terme d'échange net  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j}$ . Un rayon sert à calculer l'échange net entre la maille  $i$  et toutes les autres mailles volumiques et surfaciques du système. Pour un rayon donné partant de la maille  $i$  et atteignant une surface noire  $j$ , l'intégrant  $\omega_{i \rightarrow j}$  est calculé comme précédemment ; mais l'intégrant  $\omega_{i \rightarrow k}$  servant à évaluer l'échange net entre  $i$  et une autre surface noire  $k$  est aussi "calculé" au sens où il est nul à cause de la fonction de visibilité entre  $i$  et  $k$  pour ce rayon. En généralisant, chaque rayon sert à estimer un intégrant pour le calcul des échanges nets entre la maille d'émission et toutes les autres mailles du système (volumes et surfaces). On comprend donc que tous les termes d'échanges  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j}$  ou  $\varphi_{V_i \leftrightarrow V_j}$  estimés à partir de rayons émis depuis  $V_i$  sont corrélés statistiquement. Nous verrons dans la reconstruction des bilans que cela nous oblige à une surestimation de l'erreur sur les termes d'échange.

Nous avons traité le cas du calcul de l'échange net avec une surface noire. Le calcul de l'intégrant pour un échange avec une surface réfléchissante se déroule de la même façon jusqu'à la paroi, où l'intégrant est multiplié par l'émissivité de la paroi. Nous utilisons alors un critère de troncature pour décider si nous continuons le suivi du rayon après tirage d'une direction de réflexion conforme aux propriétés de la paroi (cf. Annexe B).

La prise en compte des inhomogénéités ne pose pas de difficulté majeure et modifie l'expression de l'intégrant  $\omega$  par l'intermédiaire de la transmittivité  $\tau_{i \rightarrow j}$ . Dans un premier temps, le tirage du coefficient d'absorption  $\kappa$  dans la maille d'émission fixe une valeur de la cumulative  $g$ . Nous suivons ensuite le rayon pour cette valeur de  $g$  fixée.

## 4.6 Reconstruction des bilans à partir des échanges

Pour chaque maille, nous calculons les échanges avec toutes les autres mailles du système. En particulier pour un couple de mailles  $V_i$  et  $S_j$  nous avons calculé un estimateur pour  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j}$  et pour  $\varphi_{S_j \leftrightarrow V_i}$ , ainsi que les variances associées à ces termes. Or la loi de conservation de l'énergie impose que  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} = -\varphi_{S_j \leftrightarrow V_i}$ . Au final nous ne gardons qu'un seul de ces termes et nous choisissons celui dont la variance est la plus petite pour reconstruire le bilan radiatif de la maille  $V_i$  (Eq. 4.16 rappelée ci-dessous)

$$S_r(V_i) = \sum_{j=1}^{N_v} \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} + \sum_{j=1}^{N_s} \varphi_{V_i \rightarrow S_j}$$

Comme nous l'avons dit précédemment, deux termes  $\varphi_{V_i \leftrightarrow S_j}$  et  $\varphi_{V_i \leftrightarrow V_j}$  estimés à partir de rayons émis depuis  $V_i$  sont corrélés statistiquement. On ne peut donc pas sommer directement les variances pour calculer la variance sur l'estimateur de  $S_r(V_i)$ . On somme alors les écarts types, ce qui conduit à une surestimation de l'erreur sur le bilan radiatif calculé <sup>12</sup>.

---

<sup>12</sup>Si on reconstruit  $S_r(V_i)$  uniquement à partir d'échanges nets calculés à partir de rayons émis depuis le reste du système, alors il n'y a plus de corrélation statistique entre les termes d'échange net et on peut sommer les variances directement.

## 4.7 Application sur une géométrie axisymétrique

La validité et la pertinence de nos choix directement hérités des travaux de de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001] ont été testées pour une géométrie cylindrique monodimensionnelle infinie en hauteur, de laquelle nous partons. En ajoutant des conditions aux limites sur la dimension infinie, nous passons en géométrie axisymétrique 2D qui présente un confinement dans toutes les dimensions et permet de vérifier les optimisations de mailles de taille finie.

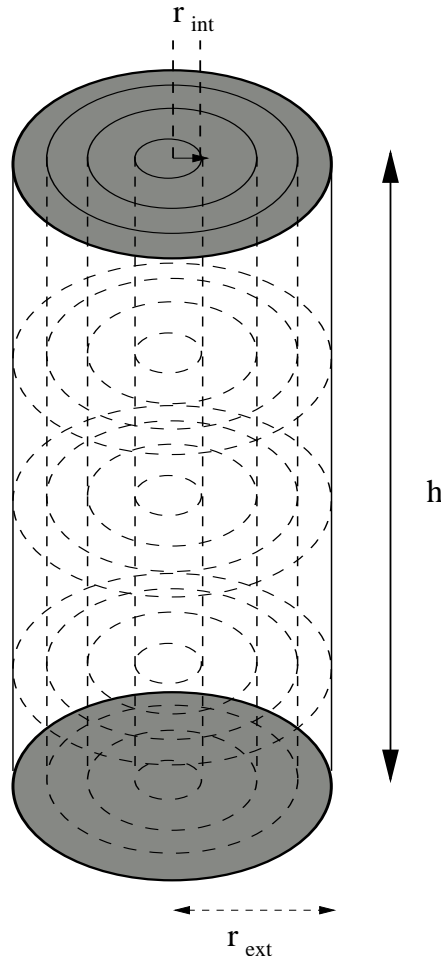


FIG. 4.10 – Système de mailles cylindriques imbriquées. Passage de la configuration monodimensionnelle de de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001] à un système axisymétrique à deux dimensions par ajout de conditions aux limites (parois) sur la coordonnée perpendiculaire à l'axe de révolution. Le système d'une hauteur  $h$  est confiné dans sa dimension radiale par des parois en  $r = r_{\text{int}}$  et  $r = r_{\text{ext}}$ .

**Système de coordonnées** Pour l'orientation et le suivi des rayons, nous utilisons un système de coordonnées lié à la symétrie du système, mais qui est différent pour chaque rayon. Nous avons à chaque fois besoin de définir les origines des angles d'orientation  $\theta$  (écart à

la normale) et  $\phi$ . Dans le cas d'une émission à partir des parois de la maille, le point de sortie du rayon définit un point sur la surface et donc une normale en ce point et à cette surface. Comme une maille cylindrique comporte quatre parois délimitantes, la normale peut être définie sur ces quatre surfaces. Fondamentalement, on n'a besoin de distinguer que deux cas : la sortie par le côté externe de la maille ou par la surface du haut (Fig. 4.11). Les autres cas (face interne et surface du bas) sont traités par symétrie des systèmes de coordonnées.

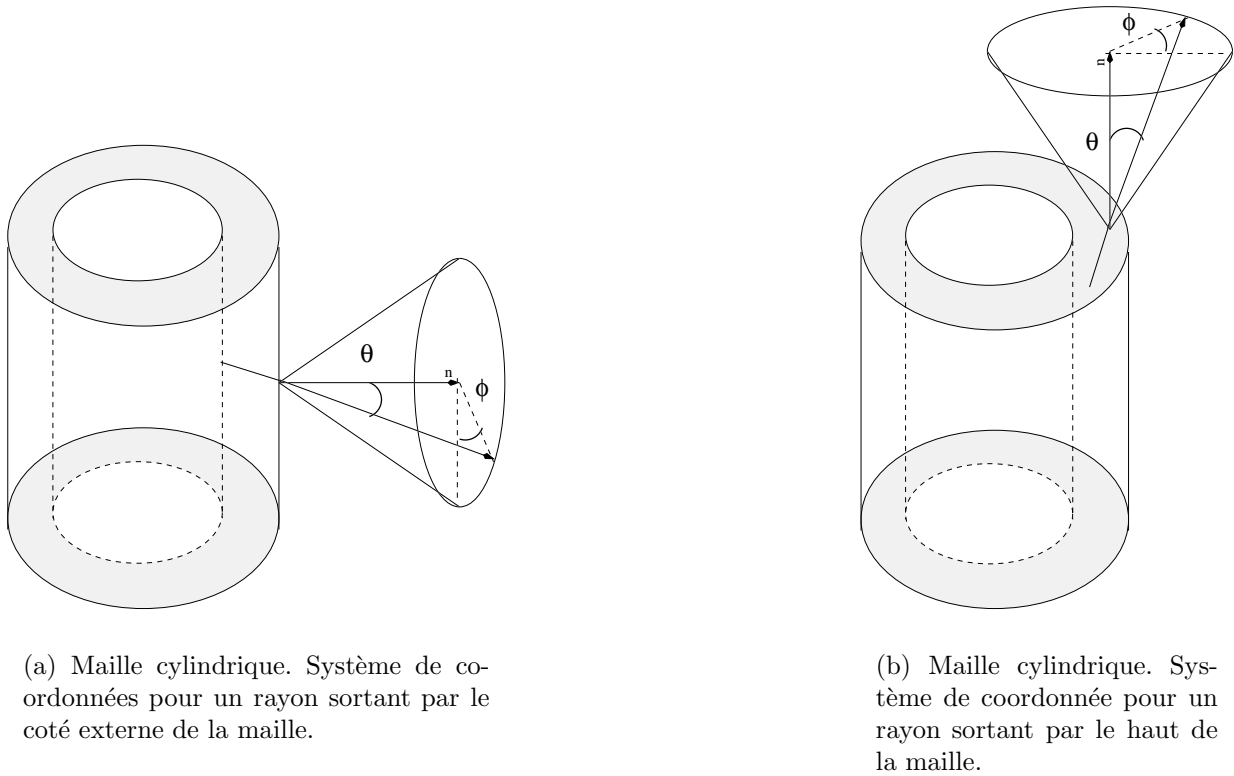


FIG. 4.11 – Le système de coordonnées est attaché à chaque rayon et dépend de la surface par laquelle il sort de la maille d'émission.

Dans le cas où le rayon sort par le côté externe de la maille, l'origine des angles  $\phi$  est prise suivant la direction de l'axe de symétrie, le 0 étant vers le bas. Si le rayon sort par le haut de la maille, l'origine des  $\phi$  est prise par rapport à la normale à l'axe de symétrie passant par le point de sortie (le 0 étant vers l'extérieur de la maille).

Supposons maintenant qu'on génère le point d'émission, non plus à partir de la surface, mais en échantillonnant directement le volume émetteur. Dans ce cas l'axe des  $\theta$  est pris parallèlement à l'axe de symétrie du cylindre au point d'émission. L'origine des  $\phi$  est alors la perpendiculaire à l'axe de symétrie au point d'émission.

### 4.7.1 Tests de validation

La démarche de validation est la suivante : d'abord nous nous ramenons à un cas de type plans parallèles traité par de Lataillade [de Guilhem de Lataillade, 2001]. Nous pouvons traiter ce type de configuration en choisissant pour notre géométrie cylindrique une hauteur grande devant son rayon. Nous approchons alors une symétrie cylindrique infinie en hauteur. En imposant maintenant un rayon interne grand au cylindre nous approchons une configuration de plans parallèles <sup>13</sup>. C'est la géométrie la plus simple que nous pouvons traiter. Nous poursuivrons notre démarche de simulation en levant le choix d'une hauteur grande devant les dimensions du système pour obtenir un cas cartésien 2D <sup>14</sup>, et nous comparons nos résultats sur cette géométrie à ceux de Clergent [Clergent, 2000]. Les mailles définies dans une enceinte cartésienne 2D sont encore de dimension infinie dans une dimension. L'étape suivante est de repasser à un cas où le rayon interne est nul pour obtenir une vraie géométrie cylindrique, qui constitue un système fermé. Dans ce dernier cas, nous confrontons nos résultats à ceux de Coelho et al. [Coelho et al., Submitted in 2002]. Nous procéderons donc à la validation de nos résultats grâce à des codes existants déjà validés.

D'autre part, nous construisons un outil multidimensionnel qui doit aussi nous servir ultérieurement à valider aussi notre code 3D complexe. En effet, la géométrie du code 3D complexe étant traitée de façon totalement générique (le code 3D fonctionne de la même façon quelle que soit la géométrie), nous pourrions essayer de retrouver les résultats obtenus avec le code 2D pour valider la partie spectrale.

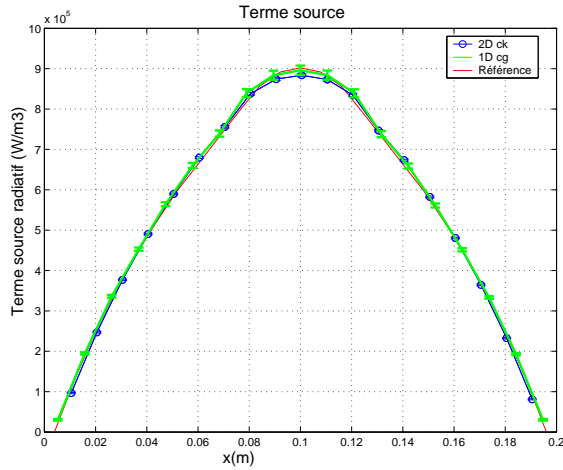
Enfin, la géométrie cylindrique 2D est souvent employée pour représenter des chambres de combustion réelles et a été traitée par de nombreux auteurs [Hottel and Sarofim, 1965, Steward and Cannon, 1971, Osuwan, 1972, Zhang et al., 1988, Soufiani and Taine, 1993, Gogel et al., 1994]. Elle représente donc en soi une configuration d'étude intéressante pouvant répondre à une demande industrielle, ou dans un autre contexte un cas académique sur lequel nous pouvons produire des solutions de référence.

#### 4.7.1.1 Configuration de plans parallèles

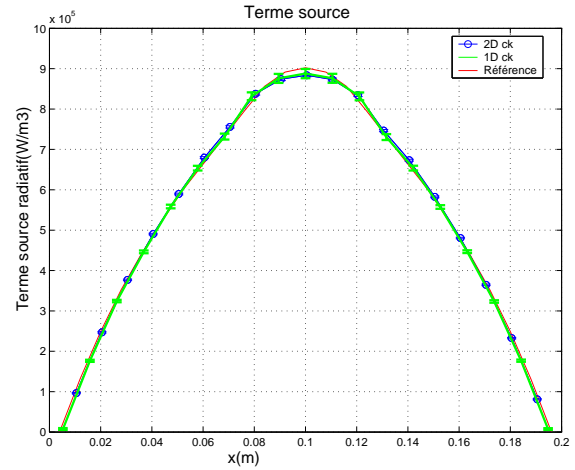
La première étape de validation consiste, comme nous l'avons annoncé, à comparer nos résultats (avec une configuration de type :  $r_{\text{int}} \gg 1$  et  $h \gg |r_{\text{ext}} - r_{\text{int}}|$ ) à ceux du code cylindrique monodimensionnel dont nous disposons dans une configuration de type plans parallèles. Nous considérons un cas où les parois sont noires à 2500K. Le milieu gazeux est constitué par un mélange 10%  $H_2O$ -90%  $N_2$  à pression atmosphérique, et présente un profil de température parabolique avec un minimum de 500K au centre de la configuration. La distance entre les parois est de 20cm. Par ailleurs, nous disposons également de résultats obtenus par une méthode raie par raie par L. Pierrot [Pierrot et al., 1999], qui nous ont été fournis par J. Taine et A. Soufiani du laboratoire EM2C (Fig. 4.12).

<sup>13</sup>Les conditions pour traiter la configuration de type plans parallèles sont donc :  $r_{\text{int}} \gg 1$  et  $h \gg |r_{\text{ext}} - r_{\text{int}}|$ . On peut également se ramener à une telle configuration avec les conditions suivantes :  $r_{\text{int}} = 0$  et  $h \ll r_{\text{ext}}$ . Les deux possibilités ont été testées.

<sup>14</sup>La seule condition pour obtenir une configuration 2D cartésienne est donc :  $r_{\text{int}} \gg 1$



(a) Comparaison entre le code cylindrique 2D et le code originel 1D. Les méthodes de traitement des inhomogénéités sont différentes.



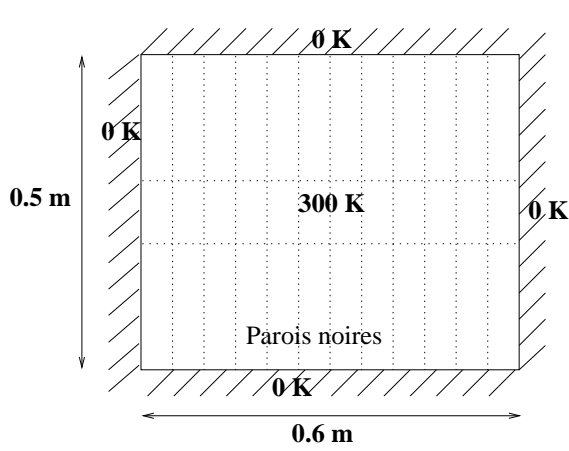
(b) Même comparaison mais avec le même traitement des inhomogénéités pour le code 1D et le code 2D.

FIG. 4.12 – Comparaison au code 1D d’origine en se ramenant à une configuration 1D. Terme source radiatif d’une cavité remplie d’un mélange 10%  $H_2O$ -90%  $N_2$  à pression atmosphérique et délimitée par deux parois noires. Le profil de température est parabolique avec un minimum de 500K au centre de la cavité. Les parois sont à 2500K. La référence indiquée est celle de Pierrot [Pierrot et al., 1999] et utilise un modèle spectral raie par raie.

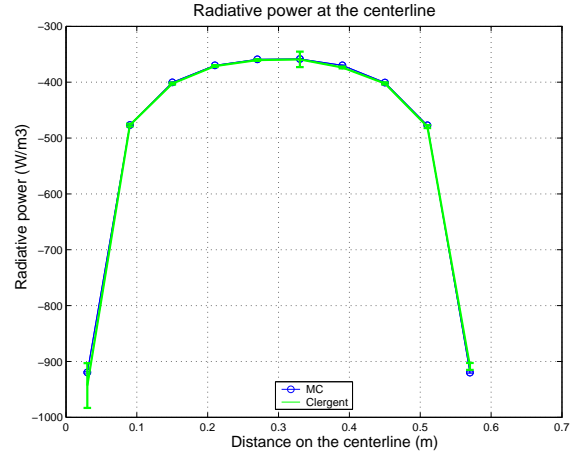
La figure 4.12(a) montre un écart léger entre les solution du code 1D et la référence de Pierrot d’une part, et les résultats du code 2D d’autre part au voisinage de la zone d’inversion de température. Le traitement des inhomogénéités se faisant par l’intermédiaire de l’hypothèse ck dans le cas 2D, et par l’intermédiaire de l’hypothèse de Curtis Godson dans le cas 1D, nous vérifions sur la figure 4.12(b) qu’un recoupement intégral est retrouvé dans le cas où on applique l’hypothèse ck au modèle 1D.

#### 4.7.1.2 Configuration 2D cartésienne

La validation suivante que nous proposons nous confronte cette fois aux résultats d’un code de résolution du transfert radiatif par la méthode de Monte Carlo, et adapté à des configurations cartésiennes 2D développé par Clergent [Clergent, 2000] au Laboratoire d’Énergétique de Toulouse. Nous nous ramenons à cette configuration en imposant cette fois encore un rayon interne grand devant les dimensions du système ( $r_{\text{int}} \gg 1$ ). Nous considérons un milieu gazeux composé de 10% de  $H_2O$ , 1% de  $CO_2$ , et 89% de  $N_2$  à pression atmosphérique et à 300K. Le système est fermé par des parois noires à 0K (Fig. 4.13(a)). Nous présentons le terme source volumique sur une ligne horizontale au centre de la configuration 4.13(b)).



(a) Configuration de simulation



(b) Terme source radiatif au centre de la configuration.

FIG. 4.13 – Comparaison avec un code Monte Carlo indépendant adapté à des géométries cartésiennes [Clergent, 2000]. On se ramène à ce type de géométrie en imposant un rayon interne grand devant les dimensions du cylindre. Le code de Clergent ne présente pas le même niveau d’optimisation que celui que nous proposons ; cela se traduit sur le graphe par des barres d’erreur remarquablement plus grandes en certains points.

Nous constatons la parfaite adéquation entre les résultats des deux codes de Monte Carlo indépendants sur un système qui reste assez simple.

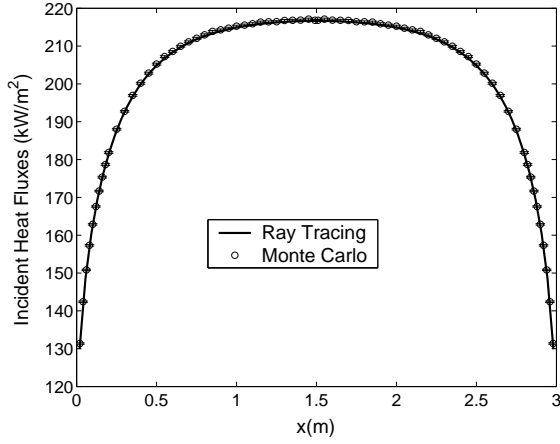
#### 4.7.1.3 Configuration 2D cylindrique

Les deux cas que nous venons de traiter ne sont pas des systèmes fermés. Dans le premier cas, nous étions en configuration plans parallèles (1D), et dans le deuxième cas en géométrie cartésienne 2D dans laquelle un rayon peut avoir une longueur tendant vers l’infini. Si nous voulons pouvoir traiter un système fermé, nous devons considérer une géométrie cylindrique 2D. Nous comparons alors nos résultats avec ceux obtenus par Pedro Coelho grâce à un algorithme de Ray Tracing [Coelho et al., Submitted in 2002].

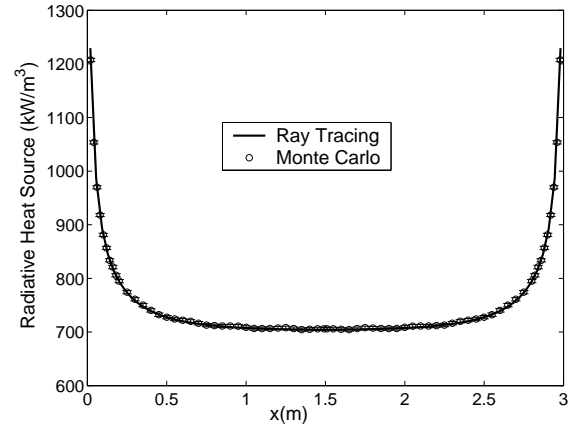
Les résultats du code de Monte Carlo et ceux du Ray Tracing considéré également comme une méthode de référence ne présentent pas de différence pour cette configuration où le milieu est homogène en température et concentration d’espèces rayonnantes.

Nous nous intéressons à présent à un milieu anisotherme et non homogène où la température et les concentrations sont données par les équations 4.35 :





(a) Flux aux parois



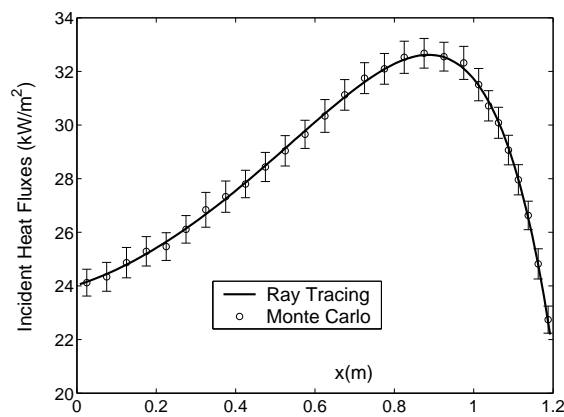
(b) Terme source radiatif au centre de la configuration.

FIG. 4.14 – Comparaison entre Monte Carlo et Ray Tracing. La configuration étudiée est un cylindre de rayon  $R = 0.5m$  et de hauteur  $L = 3.0m$ . Les parois sont noires à  $1800K$ . Le milieu gazeux est à pression atmosphérique à une température de  $300K$ . Il est composé d'un mélange 20%  $H_2O$ -10%  $CO_2$  -70%  $N_2$  avec une fraction volumique de suie  $f_v = 10^{-7}$

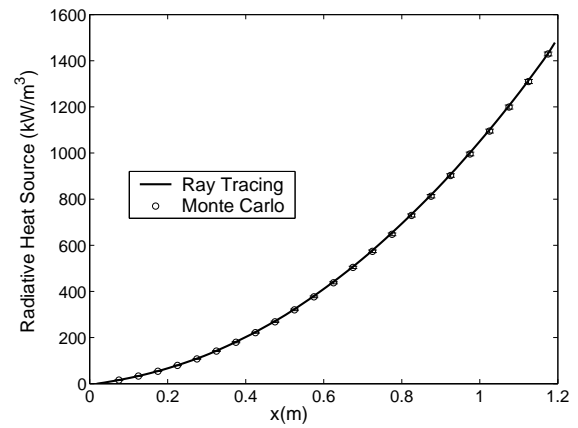
$$\begin{aligned}
 T(r, l) &= 800 + 1200 \left(1 - \frac{r}{R}\right) \left(\frac{l}{L}\right) \\
 f_{m, H_2O}(r, l) &= 0.05 \left[1 - 2 \left(\frac{l}{L} - 0.5\right)^2\right] \left(2 - \frac{r}{R}\right) \\
 f_{m, CO_2}(r, l) &= 0.04 \left[1 - 3 \left(\frac{l}{L} - 0.5\right)^2\right] \left(2.5 - \frac{r}{R}\right)
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

Les résultats sont là aussi complètement concordants avec ceux provenant du ray-tracing. On remarque par contre un écart-type plus important pour les flux aux parois. Cela peut être dû à la loi d'optimisation du tirage des bandes étroites. En effet, l'optimisation est orientée pour les échanges gaz-gaz ou gaz-paroi, et peut ne pas être adéquate pour des échanges paroi-paroi. Or dans le cas présenté sur la figure 4.7.1.3, une paroi n'est pas à la même température que les autres, et échange avec celles-ci.

Les résultats que nous avons présentés ont balayé toutes les possibilités géométriques que peut offrir un code cylindrique 2D. L'étude d'une autre géométrie par ce même code n'est pas possible sans modification majeure de sa structure. Il nous a servi à tester la validité des choix que nous avons fait, mais est maintenant limité du fait même de sa conception.



(a) Flux aux parois



(b) Terme source radiatif au centre de la configuration.

FIG. 4.15 – Comparaison entre Monte Carlo et Ray Tracing. La configuration étudiée est un cylindre de rayon  $R = 0.3m$  et de hauteur  $L = 1.2m$ . Les parois sont noires à  $800K$ , exceptée la paroi en  $l = L$  qui est à  $300K$ . Le milieu gazeux est à pression atmosphérique avec une fraction volumique de suie  $f_v = 10^{-7}$ . La composition et la température du milieu sont données par les équations 4.35

## Chapitre 5

# Construction et optimisation de l'outil 3D

Au chapitre précédent, nous avons mis en place une modélisation du transfert radiatif que nous avons utilisée dans une géométrie bidimensionnelle cylindrique. Nous avons alors validé notre outil de calcul bidimensionnel dans l'ensemble des configurations qu'il peut traiter : plans parallèles, géométrie cylindrique infinie, et géométrie cylindrique 2D. Ces configurations, bien que très souvent étudiées dans des applications de transfert radiatif pour leur ressemblance avec des géométries réelles restent simples, et ne peuvent satisfaire entièrement aux besoins de dimensionnement des procédés industriels. A ce stade, le passage à des configurations plus complexes n'est pas possible sans réécriture d'un nouveau code de calcul.

La construction d'un outil offrant la possibilité d'être réutilisé quelle que soit la géométrie demande de se placer à un niveau d'abstraction supérieur dans la phase d'analyse du problème. Nous utilisons un langage orienté objet, dont le principe a été exposé au chapitre 3, pour élaborer notre outil. Nous devons donc dans un premier temps déterminer quels sont les objets (au sens de la programmation orientée objet) que nous utiliserons. Nous exposerons ensuite les optimisations utilisées pour l'accélération du suivi des rayons dans une géométrie complexe.

Des exemples d'applications ont été traités et viendront illustrer cette démarche. Ils présentent une exploration des possibilités offertes par l'outil de calcul que nous avons construit. Nous devons souligner une différence notable par rapport aux résultats du chapitre précédent : nous ne calculons pas le bilan radiatif des mailles du système, mais le terme source radiatif en un point, que nous déplaçons dans le système comme une sonde. Cela ne remet nullement en cause l'édifice méthodologique et théorique construit jusqu'ici puisqu'il s'agit d'une application du travail précédent dans la limite où la taille d'une maille tend vers 0. La question du calcul de l'ensemble des échanges entre mailles demande une réflexion plus approfondie et fait partie des discussions actuelles au sein de notre groupe de travail <sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Ce travail est le fruit d'une collaboration entre l'Institut de Recherche en Informatique de Toulouse, l'Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, le Laboratoire d'Energétique de Toulouse, et l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales, à travers le cadre d'une ATIP sur les *Algorithmes de Monte Carlo pour la Simulation des Transferts Radiatifs en Combustion*.

## 5.1 Définition des objets

Pour un problème donné, il n'existe pas une représentation unique de la solution. Des objets différents peuvent être définis par des concepteurs différents. La base du choix des objets vient par contre uniquement de la définition du problème. Nous souhaitons pouvoir faire un bilan radiatif en tout point d'un système de combustion par la méthode de Monte Carlo. En première analyse, nous devons donc être capable de construire une application qui prendra en compte une scène. Cette scène est construite à partir de ses constituants qui seront à priori :

- d'une part des objets matériels définissant la géométrie
- d'autre part un milieu gazeux participant défini par une liste de profils de températures et de concentrations d'espèces rayonnantes

Pour effectuer le lancé de rayons et calculer le terme source volumique en un point, nous aurons par ailleurs besoin d'une entité que nous nommerons *évaluateur*, et bien sûr d'un objet rayon.

La propagation des rayons se fera au travers d'une grille englobant la scène et composée de sous-volumes correspondant à un découpage de l'espace. De plus la définition de la scène doit se faire à partir de fichiers d'entrée et le passage au format interne du programme nécessite donc la création d'un convertisseur de format. Dans un premier temps nous pouvons donc donner une représentation simple des objets à définir et de leurs interactions à partir de ces constats et en utilisant la syntaxe UML (Unified Modeling Language) (Fig. 5.1).

### 5.1.1 Définition de la scène

Plutôt que de travailler sur l'information elle-même comme en programmation traditionnelle (traditionnelle signifiant ici séquentielle, avec des appels de fonctions et hautement non réutilisable), on portera nos efforts sur la modélisation de l'information. Des caractéristiques communes à certains types sont alors définies, et l'utilisation d'un langage orienté objet comme le  $C^{++}$  est particulièrement adapté à cette logique.

### 5.1.2 Primitives géométriques

Pour construire l'aspect géométrique d'une scène, nous utilisons des primitives simples que nous combinons pour donner des objets complexes. Ces primitives sont des formes géométriques pour lesquelles il est aisé de calculer l'intersection avec une droite, et donc avec un rayon lumineux. Nous utilisons le format de définition *VRML* (Virtual Reality Modelling Language) d'une scène. Ce format a l'avantage d'être standard et de pouvoir être généré directement par des modeleurs commerciaux comme *AutoCad*. Comme il s'agit d'un véritable langage composé de mots clés et de règles syntaxiques, il est également possible à un utilisateur de créer un fichier par lui-même. Les primitives que nous utilisons le plus couramment sont :

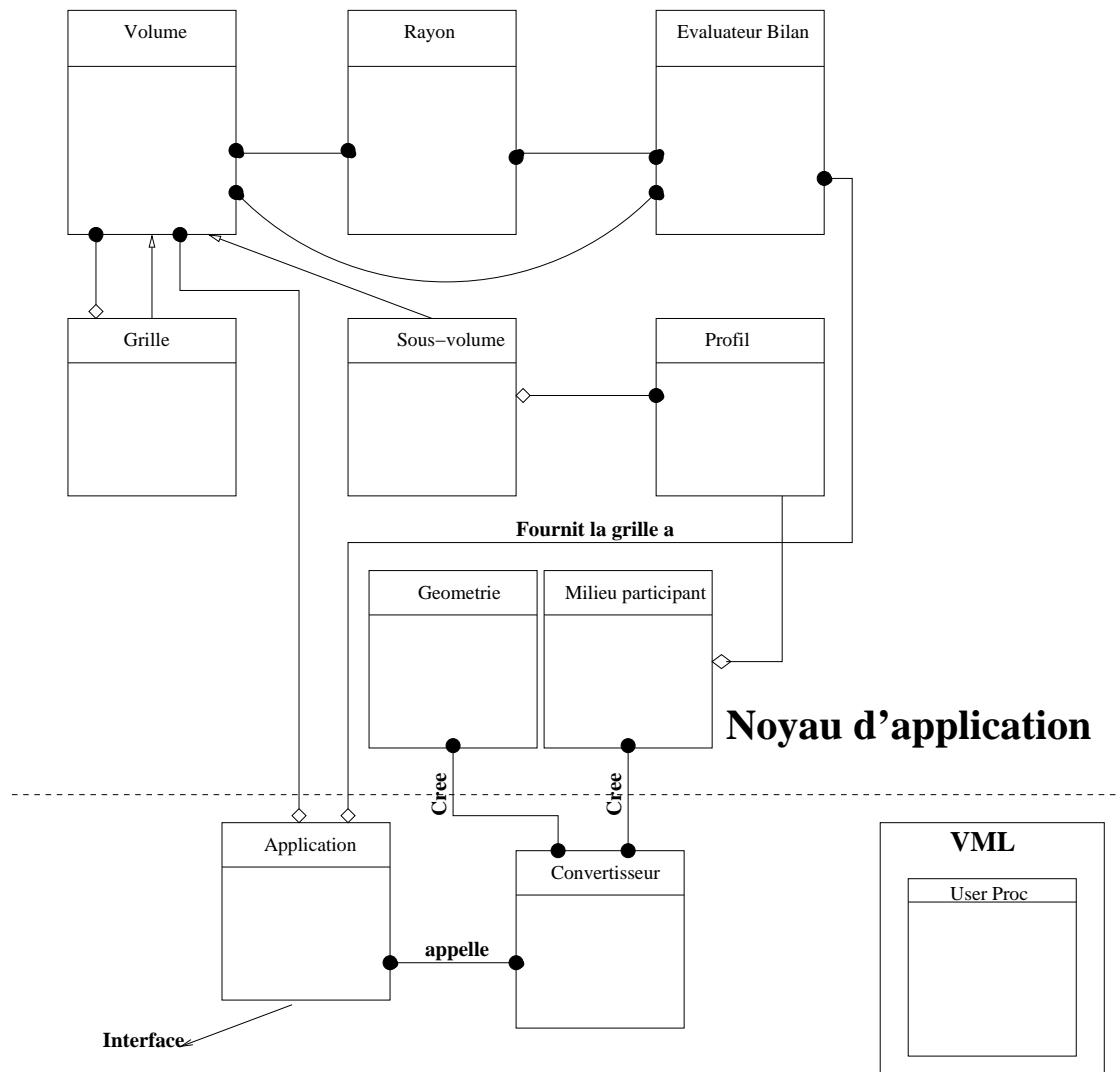


FIG. 5.1 – Diagramme schématisant la construction de la solution.

- des facettes (pour lesquelles le mot clé en VRML est : IndexedFaceSet) définies par trois sommets ou plus. Ces facettes sont orientées suivant *la règle du tire-bouchon*. L'ordre des sommets définit donc l'orientation de la normale, et elle est sortante lorsque les points sont donnés dans le sens des aiguilles d'une montre.
- des cylindres (Cylinder) qui peuvent être fermés ou ouverts. Ils sont définis par leur hauteur et leur rayon
- des sphères (Sphere) définies par leur rayon
- des cônes (Cone) définis par le rayon de leur base et leur hauteur
- de boîtes définies par leur taille et la coordonnée de leur centre
- mais aussi par exemple du texte

On définit également des règles que doivent suivre les objets géométriques :

1. Une normale orientée peut être définie en tout point d'un objet géométrique

2. Il faut également pouvoir définir une tangente en tout point

Pour construire la scène, il faut également disposer ces objets dans l'espace. Ceci se fait au moyen des transformations géométriques de base que sont la translation, la rotation, et l'homothétie. Le langage VRML permet également de définir certaines caractéristiques de la forme créée comme la couleur en utilisant une base RGB (Red, Green, Blue).

De plus, ce langage offre la possibilité d'introduire de nouveaux objets qui ne sont pas explicitement définis dans la version de base. Nous définissons ainsi deux nouveaux objets pour définir les champs de température et de concentration tels qu'ils peuvent provenir d'un code de mécanique des fluides :

- un objet *Profile* qui contient une liste de points avec une liste de valeurs associées.
- un objet *ParticipatingMedia* qui est une liste d'objets de type *Profile*

Nous sommes partis de l'hypothèse que le maillage de mécanique des fluides nous renverrait pour chaque maille une valeur unique de la grandeur considérée. Ainsi, chaque champ est défini comme une suite de coordonnées, et à chaque coordonnée est associée une valeur du champ défini.

Une scène est donc ensuite définie comme une liste de primitives géométriques et une liste de profils (de températures et de concentrations d'espèces rayonnantes) contenue dans l'objet *ParticipatingMedia*.

### 5.1.3 Exemple : modélisation d'un four

Nous choisissons ici une configuration géométrique proche d'un four industriel et largement inspirée de la forme qu'on peut trouver dans [Boineau et al., 2002]. La forme créée reste géométriquement simple et ne comprend qu'une trentaine de facettes (Fig.5.2). Le code de description de ce four est détaillé en annexe C. Des calculs de termes sources radiatifs et de sensibilités dans ce four seront présentés dans la dernière partie de ce chapitre.

## 5.2 Trajectographie et calcul des intersections

Dans les techniques de lancé de rayons, la majeure partie du temps de calcul est passée à l'évaluation des intersections entre les rayons et la géométrie en l'absence de milieu participant (de 75% à 95% du temps de calcul [Fujimoto et al., 1986]). Il paraît donc essentiel d'essayer de limiter ce temps de calcul en limitant le nombre d'intersections évaluées.

En préliminaire à la présentation des techniques envisageables pour accélérer le suivi des rayons, nous souhaitons introduire la notion de voxel (Fig. 5.3), qui a donné lieu à bien des discussions lors de ce travail de thèse. Formellement, le voxel est l'extension directe de la notion de pixel (structure planaire 2D) à la dimension supérieure (3D). C'est donc le plus petit élément de volume, résultant du découpage d'une scène selon des critères définis par l'utilisateur. Par extension de langage, on continue à appeler voxel, une zone de volume à laquelle on associe des propriétés pour en faire un objet au sens de la programmation objet.

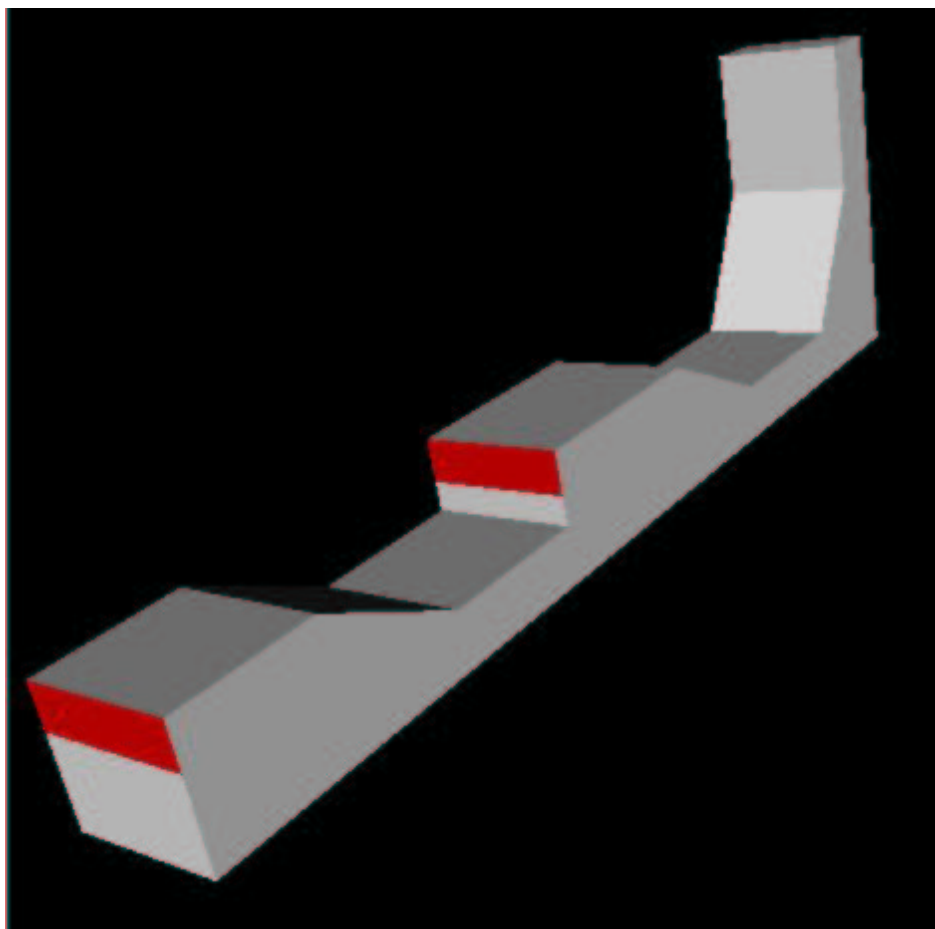


FIG. 5.2 – Géométrie représentant un four de type industriel. Les brûleurs sont représentés par les zones en rouge sur la figure. La partie la plus à droite de l’image est une cheminée d’évacuation des fumées.

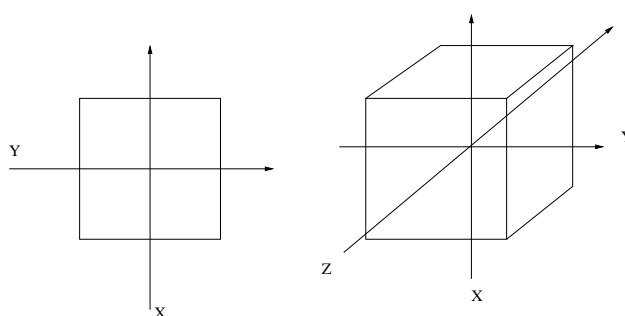


FIG. 5.3 – Voxel : extension de la notion de pixel en 3D. Comme le pixel est la plus petite unité de surface (composant en général une image sur un écran), le voxel est un volume indivisible dans une scène discrétisée.

Ainsi, pour nous, un voxel est une zone de volume contenant des éléments géométriques, ainsi que des profils de températures et de concentrations. Le voxel est une notion que l'on retrouve dans un grand nombre de techniques d'accélération du calcul de l'illumination globale par lancé de rayons.

Ces techniques peuvent être grossièrement classées en deux catégories : celles réalisant un abaissement du temps de calcul par la diminution du nombre de rayons nécessaires à un niveau de précision donné (telles que l'introduction des fonctions de densités de probabilités présentées au chapitre 4), et celles portant un effort sur la diminution du coût directement dû au calcul des intersections (nombre d'intersections calculées par rayon, ainsi que temps d'évaluation de chaque intersection) (Fig. 5.4).

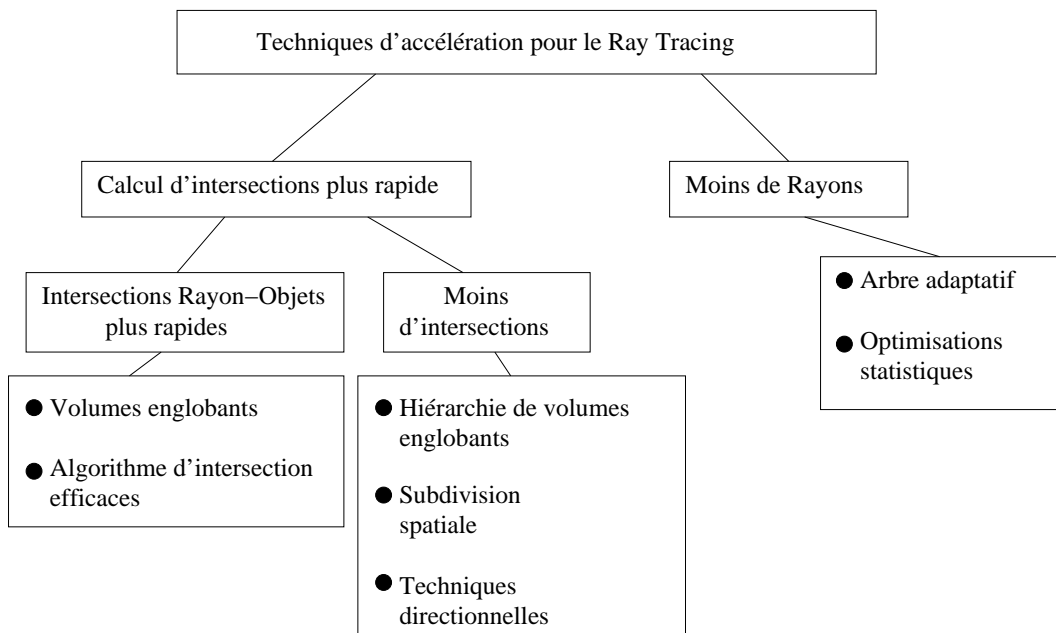


FIG. 5.4 – Techniques d'accélération pour le lancé de rayons [Arvo and Kirk, 1989]

## 5.3 Structures de données

Une façon efficace de limiter le temps de calcul venant du nombre d'intersections à évaluer est donc de diminuer ce nombre d'évaluations. Ceci ne peut se faire qu'en sélectionnant les objets qui doivent être testés pour rechercher une éventuelle intersection. Le classement des objets géographiquement proches en groupes revient à essayer de ne tester que ceux susceptibles d'appartenir à la zone de propagation d'un rayon.

D'autre part, une partition de l'espace dans une structure de données a pour effet de classer les objets le long du trajet d'un rayon. On va d'abord tester l'intersection avec les objets qui sont les plus proches du point d'émission et continuer jusqu'à ceux qui sont les



plus éloignés On réalise ainsi une économie de temps de calcul en arrêtant le suivi d’un rayon relativement tôt, quand on détecte effectivement une intersection.

### 5.3.1 Volumes englobants

Un moyen simple de délimiter une région autour d’un objet géométrique est d’inclure celui-ci dans une forme géométrique simple. Si un objet est composé d’un grand nombre de primitives géométriques (facettes, cônes, cylindres,...), l’évaluation de son intersection est coûteuse en temps de calcul, puisqu’il faut tester chacun de ses constituants. Dès lors, si cet objet est englobé dans (délimité par) un volume plus simple comme une sphère ou un cube, on ne testera son éventuelle intersection avec un rayon, que si celui-ci pénètre d’abord le volume englobant [Rubin and Whitted, 1980]. Comme la géométrie du volume englobant est simple, on peut évaluer son intersection avec le rayon de façon très simple. Par contre, on fait autant de tests sur les volumes englobants qu’il y a d’objets.

Pour pallier à cet inconvénient, on peut également envisager d’emboîter plusieurs niveaux de volumes englobants pour regrouper des objets et de créer ainsi une hiérarchie [Arvo and Kirk, 1989] (Fig. 5.5).

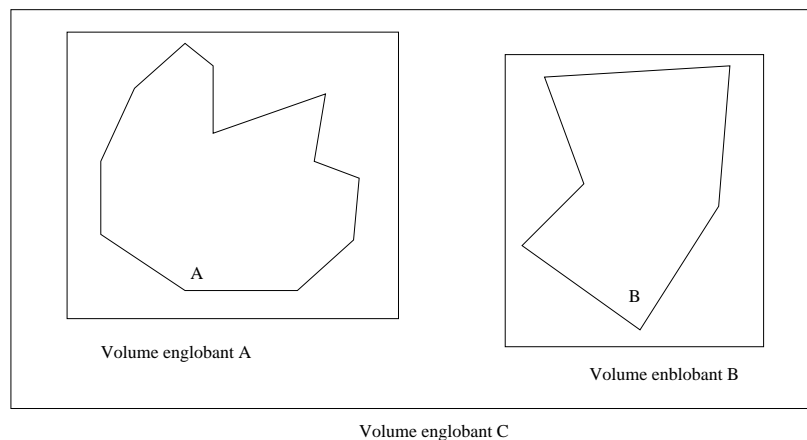


FIG. 5.5 – Volumes englobants. Un objet géométriquement complexe est délimité par une forme plus simple. On peut définir plusieurs niveaux de volumes englobants.

On teste alors successivement des volumes imbriqués et on réduit aussi le nombre de tests pratiqués sur des objets eux-mêmes. L’importance de la forme des volumes englobants est discutée dans [Weghorts et al.]. Si un volume englobant est mal adapté à la forme de l’objet qu’il contient, alors un grand nombre de rayons qui traversent ce volume n’ont aucune chance de rencontrer l’objet, ce qui entraîne un grand nombre de tests d’intersection inutiles. A l’inverse, si le volume englobant épouse parfaitement l’objet qu’il contient, il peut avoir une forme complexe pour laquelle le test d’entrée est presque aussi coûteux que le test d’intersection avec l’objet contenu.

### 5.3.2 Grilles régulières

Un autre moyen de délimiter l'espace est de créer un maillage régulier de celui-ci, et d'affecter dans chaque zone ainsi créée les objets qui sont entièrement ou même partiellement à l'intérieur. Le suivi de rayon se fait alors en déterminant la suite de volumes traversés et en testant pour chaque volume les éventuelles intersections avec la liste d'objets associée. Ce maillage n'est pas optimal, surtout en cas de fortes disparités géographiques des objets dans la scène. Si les objets sont tous regroupés, la majorité des voxels créés seront vides, et on aura un grand nombre d'intersections à calculer quand on traversera un voxel non vide. Une solution adaptée à ce type de problème paraît donc être une subdivision plus grande de l'espace aux endroits de forte complexité géométrique. Les grilles régulières sont parfois désignées par l'acronyme SEADS (Spatially Enumerated Auxiliary Data Structure) et ont été introduites par Fujimoto et al. [Fujimoto et al., 1986].

### 5.3.3 Octrees et n-trees

Pour limiter le nombre de volumes créés par la division de l'espaces en zones indépendantes, on a recours à une subdivision récursive en fonction d'une complexité locale donnée. Comme précédemment la scène est d'abord englobée dans un cube. On divise ensuite celui-ci de manière régulière en sous-espaces fils de forme cubique [Maeda and Ogawa, 1995]. Ces sous-espaces peuvent eux-mêmes être subdivisés de la même manière. Lorsqu'un volume est divisé par deux sur chaque axe, on obtient huit sous-volumes. La structure récursive associée est alors appelée *octree* (Fig 5.6). Le nombre de subdivisions sur chaque axe peut être différent de deux, et on parlera alors de *n-trees* ou de grilles récursive multi-niveaux.

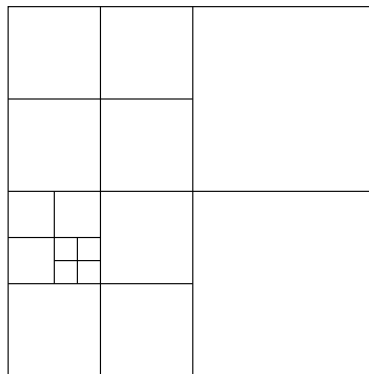


FIG. 5.6 – Exemple de subdivision récursive de l'espace dans un cas à 2 dimensions : le quadtree (qui est l'équivalent d'un octree, mais limité à deux dimensions). La subdivision découpe à chaque fois une surface en 4 nouvelles surfaces de même dimension.

A chaque division, on affecte dans les nouveaux volumes, les caractéristiques de la scène relatives à ces zones (par exemple la liste des objets et des profils contenus dans chacun des sous-volumes).

En synthèse d’images, le critère de subdivision (aussi appelé oracle de subdivision) est en général purement lié à la complexité géométrique de chaque zone de volume ainsi créée. Il est également important de limiter la profondeur de subdivision (i.e. le nombre de subdivisions successives) pour ne pas passer trop de temps à accéder aux informations liées à chaque zone de volume, dans la structure de données résultant de ce découpage récursif de l’espace [Stolte and Caubet, 1995a,b].

Cette structure récursive peut aussi être représentée par la figure arborescente 5.7. La forme géométrique englobant la scène constitue le sommet de l’arbre, et les subdivisions éventuelles sont représentées sous forme de noeuds vers les volumes inclus. Les volumes qui ne sont plus subdivisés, et qui correspondent à des voxels, représentent les feuilles de l’arbre. C’est une structure descendante, mais dans le cas de représentation multi-échelles, on peut également trouver des liens bidirectionnels qui permettent de remonter des feuilles vers les racines.

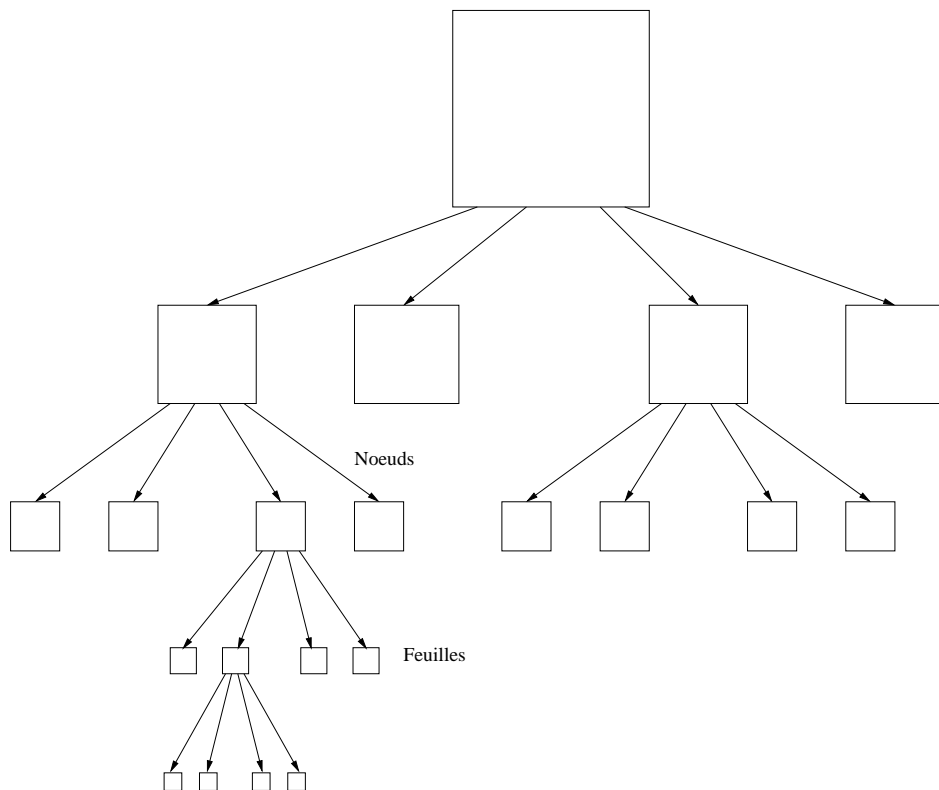


FIG. 5.7 – Arborescence représentant la structure d’un quadtree .

Les difficultés sur ce type de structure apparaissent pour des scènes de grande précision sur plusieurs échelles de grandeurs. Si la scène complète est de grande dimension, mais comporte des détails de petite dimension, alors on est obligé de prendre un arbre très profond, et dont le parcours est par conséquent coûteux .

On peut remarquer que cette structure représente finalement une hiérarchie récursive de

volumes englobants et contient donc les propriétés de ce type d'organisation.

### 5.3.4 BSP Tree

Un autre algorithme de subdivision s'appuyant sur une subdivision régulière a été proposé par Kaplan [Kaplan, 1985] sous le nom de BSP (Binary Space Partitioning) Tree. L'espace est divisé en deux par un plan, puis chaque sous-espace peut l'être à son tour jusqu'à une profondeur maximale définie par l'utilisateur. Chaque plan de subdivision est disposé de telle manière qu'il y ait le même nombre d'objets de part et d'autre du plan. Cela assure donc une répartition plus homogène des objets dans chaque zone d'espace créée dans la scène (Fig. 5.8).

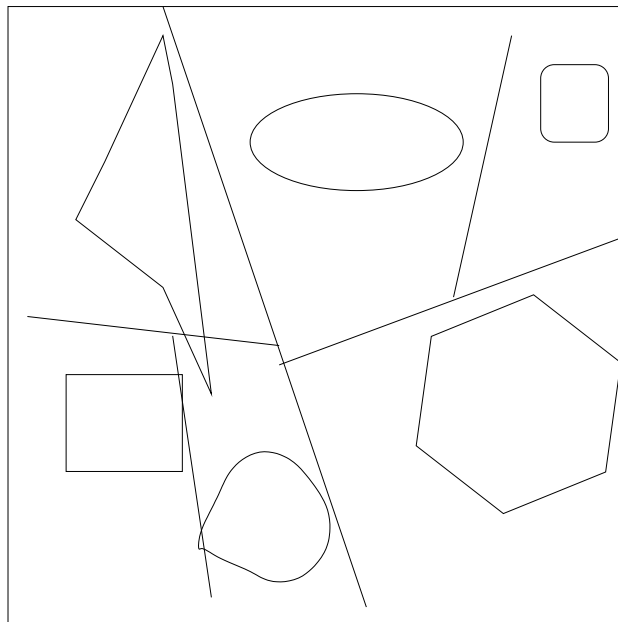


FIG. 5.8 – Découpage de l'espace suivant un BSP tree.

### 5.3.5 Géométrie discrète

Une tentation très grande pour minimiser le temps de calcul est de passer à une représentation discrète de la scène. Pour cela, on subdivise la scène finement, soit par une grille régulière, soit par une grille hiérarchique, et on affecte une valeur à chaque voxel obtenu : “plein” si le voxel contient de la matière (un objet et présent), et “vide” sinon. Bien sûr, on peut utiliser un critère moins simple, basé sur le taux d'occupation d'un voxel par de la matière. Il en résulte une scène discrétisée dans laquelle on génère aussi des rayons discrets. Ce type d'approche amène cependant à des problèmes topologiques typiques [Delfosse, 1996].

Un calcul d'intersection entre un rayon et la géométrie se fait alors simplement par un test booléen de rencontre avec un voxel plein : soit le voxel rencontré est “plein” et une

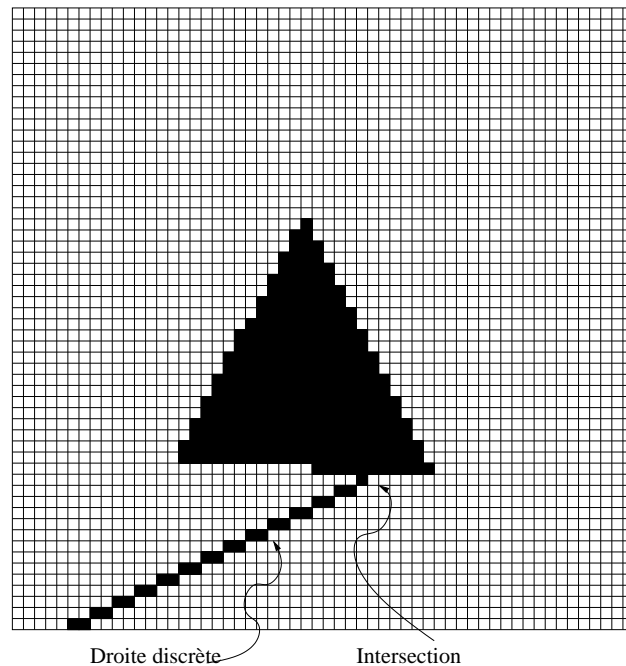


FIG. 5.9 – Discrétisation (ou rasterisation) d’une scène 2D. La scène est représentée par des pixels vides ou pleins. Le suivi de rayons se fait en utilisant les propriétés des droites discrètes dans un espace 2D. La généralisation à  $n$  dimensions ne pose aucune difficulté.

intersection est trouvée, soit il est vide et le suivi du rayon continue. Le temps de calcul devient par conséquent indépendant du nombre d’objets contenu dans la scène

### 5.3.6 Classification 5D des rayons

Arvo et Kirk [Arvo and Kirk, 1987] proposent de créer des structures communes pour les rayons venant de la même zone de volume (3D) et se propageant dans le même angle solide (2D). Ils se servent de volumes englobants 5D (hyper-cubes) comprenant chacun une liste d’objets candidats à une éventuelle intersection pour tout rayon compris dans cet hyper-volume. Cette idée de classification est reprise par Lafortune et Willems [Lafortune and Willems, 1995] pour stocker des valeurs radiatives et améliorer la convergence d’un calcul par la méthode de Monte Carlo.

### 5.3.7 Choix de la structure accélératrice du suivi des rayons

Que ce soit pour une grille régulière, un octree, ou une grille récursive, la complexité reste linéaire. En théorie, ces trois approches sont donc valables. Mais en pratique, pour le genre de scène que nous souhaitons traiter, on observe qu’une grille récursive est plus adaptée [Havran and Purgathofer, 2000, Havran and Bittner, Szirmay-Kalos et al., 2002].

## 5.4 Suivi des rayons

Notre principal souci est le suivi des rayons dans la géométrie définissant la scène. Suivi des rayons voulant dire “détermination de sa trajectoire géométrique”, ainsi que “évaluation des intersections avec les objets où les parois de la scène”. Nous commençons donc par expliquer par quelle méthode nous déterminons le parcours d’un rayon dans une grille composée de voxels de taille régulière.

### 5.4.1 Parcours de la grille

L’algorithme de suivi de rayons proposé par Amanatides et Woo [Amanatides and Woo, 1987] concerne la traversée rapide de grilles et est une variante de l’algorithme DDA (Digital Differential Analyser). Il ne nécessite pas d’axe préférentiel à la différence de celui de Fujimoto et al. [Fujimoto et al., 1986], basé sur un DDA simple. Le principe est expliqué dans un espace 2D, et l’extension en 3D ne nécessite aucun apport supplémentaire (Fig. 5.10).

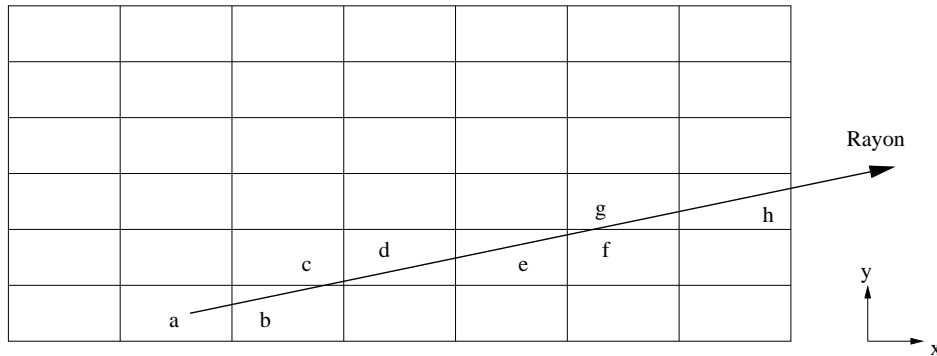


FIG. 5.10 – Algorithme de traversée de grille rapide.

L’équation du rayon est donnée par  $\vec{u} + t\vec{v}$  où  $\vec{u}$  est la coordonnée du point d’émission,  $\vec{v}$  le vecteur directeur, et avec  $t \geq 0$ . Nous nous appuyons sur cette représentation pour déterminer la suite de voxels traversés (ici : a, b, c, d, e, f, g, h), et la longueur du rayon dans chaque voxel (qui peut être traduite en valeurs de  $t$ ).

La phase d’initialisation consiste à trouver dans quel voxel de la grille est situé le point d’origine  $\vec{u}$ . Si ce point n’est pas dans la grille, on détermine par quel point le rayon pénètre dans la grille et on sélectionne le voxel adjacent. En affectant les coordonnées  $X, Y$  au voxel de départ, nous changeons de voxel uniquement par pas de 1, ou  $-1$  sur les dimensions  $x$  et  $y$ . Les variables  $X$  et  $Y$  représentant le sens de propagation pour les deux axes  $x$  et  $y$  sont donc initialisées à 1 ou  $-1$  suivant les valeurs de  $\vec{v}$ .

Ensuite, la distance à laquelle le rayon rencontre la première paroi délimitant le voxel dans lequel il se trouve sur l’axe  $x$  est évaluée, et la variable  $tMaxX$  est initialisée à cette valeur. Le même traitement est appliqué pour la variable  $tMaxY$  sur l’axe  $y$ . La plus petite des deux valeurs donne la distance à franchir avant de sortir du voxel courant.

Enfin, les quantités  $t\Delta X$  et  $t\Delta Y$  qui indiquent (en unité de  $t$ ) les distances à parcourir pour couvrir la largeur d’un voxel sur chaque axe sont calculées. L’algorithme de parcours de la grille se résume alors à une série de comparaisons pour savoir quel est le prochain voxel atteint.

Dans le cas où la scène est entièrement discrétisée, le calcul des intersections entre la scène et le rayon revient à évaluer si le rayon discrétisé (la suite des voxels par lesquels le rayon passe) et la scène discrétisée ont des voxels en commun.

L’extension de cet algorithme à des grilles multi-niveaux se fait simplement de manière récursive en modifiant les dimensions employées suivant la taille des voxels.

### 5.4.2 Evaluation des intersections

A chaque voxel traversé correspond une liste d’objets que le rayon peut éventuellement rencontrer. Mais un objet n’est pas confiné à un voxel, et on peut donc trouver une intersection entre le rayon et un objet de la liste, mais en dehors du voxel.

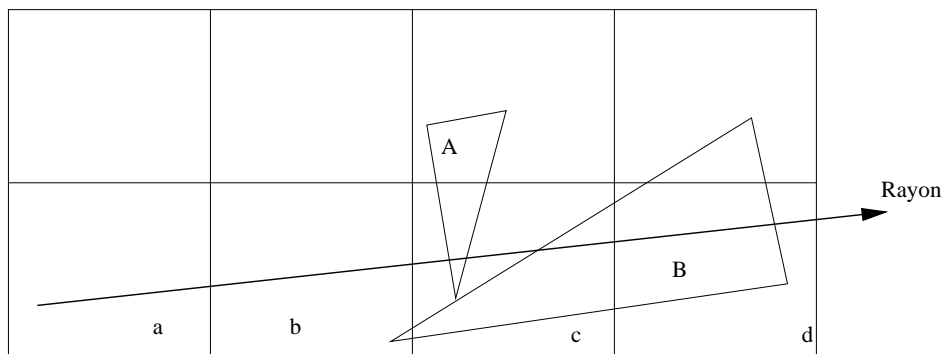


FIG. 5.11 – Evaluation des intersections.

Sur la figure 5.11, le voxel  $b$  contient l’objet  $B$ , mais l’intersection entre le rayon et  $B$  n’est pas dans  $b$ . Par conséquent, on ne doit pas la retenir, et continuer l’algorithme par le parcours dans le voxel  $c$ . Le voxel  $c$  contient deux objets, et l’intersection retenue doit être celle avec l’objet  $A$  qui correspond à une plus faible valeur de  $t$ .

Pour pouvoir estimer comment le point d’intersection est lui-même éclairé par les sources de lumière, des rayons sont à nouveau générés à partir de celui-ci. En même temps que les coordonnées du point d’intersection, on récupère la normale à l’objet rencontré en ce point, la longueur du rayon entre le point d’émission et le point d’intersection, ainsi qu’un pointeur sur l’objet intercepté de façon à pouvoir accéder à ses caractéristiques physiques.

### 5.4.3 Exemple d’intersection avec un cylindre

Si on veut calculer l’intersection d’un cylindre orienté sur l’axe  $y$  et centré en  $0$ , on utilise la position  $\vec{O}$  du point d’émission,  $\vec{D}$  la direction du rayon, et le rayon du cylindre  $r$ . Nous

n'évaluons ici que l'intersection avec les côtés du cylindre et pas avec la base et le haut de celui-ci. La condition d'intersection entre le rayon et l'objet s'écrit :

$$(\vec{O}(x) + \vec{D}(x).t)^2 + (\vec{O}(z) + \vec{D}(z).t) = r^2$$

Ce qui peut se ramener à une équation du second degré en  $t$  qui est, nous le rappelons, la longueur du rayon exprimée en unité du vecteur directeur du rayon :

$$t^2 [\vec{D}(x)^2 + \vec{D}(z)^2] + t [2(\vec{O}(x))(\vec{D}(x)) + 2(\vec{O}(z))(\vec{D}(z))] + [(\vec{O}(x))^2 + (\vec{O}(z))^2 - r^2] = 0$$

La résolution de cette équation donne, en cas d'intersection, deux racines réelles. Si les deux sont négatives, les intersections trouvées ne sont pas dans le sens de propagation du rayon et aucune ne doit être retenue. Dans le cas où les deux solutions sont positives, cela signifie qu'elles sont dans le sens de propagation du rayon. La solution la plus proche est celle qui sera retenue, à moins que le rayon puisse traverser l'interface et se propager dans l'objet sans déviation <sup>2</sup>(auquel cas on peut garder les deux). Enfin dans le cas où on a une solution positive et une négative, le rayon a été émis de l'intérieur du cylindre et seule la solution positive doit être gardée.

## 5.5 Oracle de subdivision adapté à un milieu participant

Nous utilisons une grille multi-niveaux pour réduire la complexité locale du milieu. Habituellement en synthèse d'image, sans milieu participant, la complexité se définit uniquement par le nombre de primitives géométriques présentes dans une zone de volume ou dans un voxel. Nous ajoutons ici une complexité liée à la présence de champs de température et de concentration traduisant la présence de gaz rayonnant dans le volume. Il nous faut donc tenir compte aussi de cette complexité pour évaluer le besoin d'une subdivision supplémentaire.

Il se pose la question de choisir entre le découplage des deux complexités que nous nommerons respectivement géométrique et physique, par la construction de deux structures de données ou de n'en garder une seule. Dans la mesure où nous évaluons la complexité globale du milieu, nous avons choisi de n'en garder qu'une. De toute façon la subdivision physique ne peut être négligée dans la mesure où c'est elle qui commande la précision du calcul, alors que la subdivision géométrique est faite pour des besoins d'accélération du calcul. Nous effectuons donc en même temps la subdivision physique et la subdivision géométrique pour éventuellement accélérer le suivi des rayons dans les zones créées.

Dans la mesure où nous avons choisi de décrire les champs physiques par une série de coordonnées associées chacune à une valeur (donnant la valeur d'un champ en un point), un premier critère de subdivision peut être d'imposer une valeur unique d'un champ dans chaque voxel. Ceci n'est pas aberrant car, si ces données représentent les sorties d'un code

---

<sup>2</sup>Dans la cas d'un tube en verre par exemple



de mécanique des fluides, elles correspondent chacune à une valeur associée à une maille. En première approximation, nous remaillons donc l’espace en respectant grossièrement le découpage de mécanique des fluides. La correspondance exacte, qui peut être un objectif ultérieur, est un sujet sur lequel nous n’avons pas pour l’instant travaillé.

Un critère moins sévère peut être mis en place en laissant une marge  $m$  de variation pour une grandeur dans un voxel. Cette marge  $m$  est laissée à la discrétion et à l’expérience de l’utilisateur ; il est difficile de définir un critère général car cela dépend des applications étudiées. Cela revient à permettre la présence de plusieurs points de mesure dans chaque voxel, chacun ne devant pas être plus éloigné de la moyenne  $M$  de plus d’une valeur  $m$ .

## 5.6 Exemples d’application

### 5.6.1 Validation dans le cas d’un cylindre

Dans un souci de validation de notre outil de calcul, nous souhaitons pouvoir confronter ses résultats à des résultats de référence dans un cas présentant un mélange de spectres de gaz et de particules. Nous reprenons notre code cylindrique 2D (basé sur une programmation classique et présenté au chapitre précédent), dans lequel nous effectuons un calcul de terme source radiatif sur l’axe de symétrie. Le milieu participant est un mélange de gaz (10%  $H_2O$ -90%  $N_2$ ) et de suie (fraction volumique  $f_v = 10^{-7}$ ) à 1200K et à pression atmosphérique. Les parois sont noires à une température de 300K. Nous définissons ensuite un cylindre correspondant, décrit au format VRML, comme scène dans le code 3D, en donnant les mêmes conditions de température, pression et concentration que dans le code 2D.

La figure 5.12 présente les résultats des codes 2D et 3D sur une moitié du cylindre (le résultat sur l’autre partie étant totalement symétrique).

La correspondance totale des deux résultats assure la validation de la partie spectrale du code sur des configurations homogènes et isothermes. De plus, le traitement de la géométrie se faisant de la même façon quels que soient les éléments qui la composent, la validation du code 3D en géométrie cylindrique assure la validité du code pour toute autre configuration.

### 5.6.2 Four schématique

Maintenant que nous avons effectué la validation spectrale du code 3D, nous souhaitons pouvoir aborder une géométrie plus élaborée qu’un simple cylindre et nous reprenons l’exemple du four présenté précédemment (Fig. 5.2) dans lequel nous imposons une température constante de 1400K. Dans la mesure où le champ de température est ici réduit à une température uniforme dans l’ensemble du système de combustion, la voxélisation se fait uniquement sur le caractère de la complexité géométrique (Fig. 5.13). La grille récursive d’accélération de suivi des rayons se met d’abord en place autour de la scène sous la forme d’un cube englobant. Puis en fonctions des complexités (trop grand nombre de faces

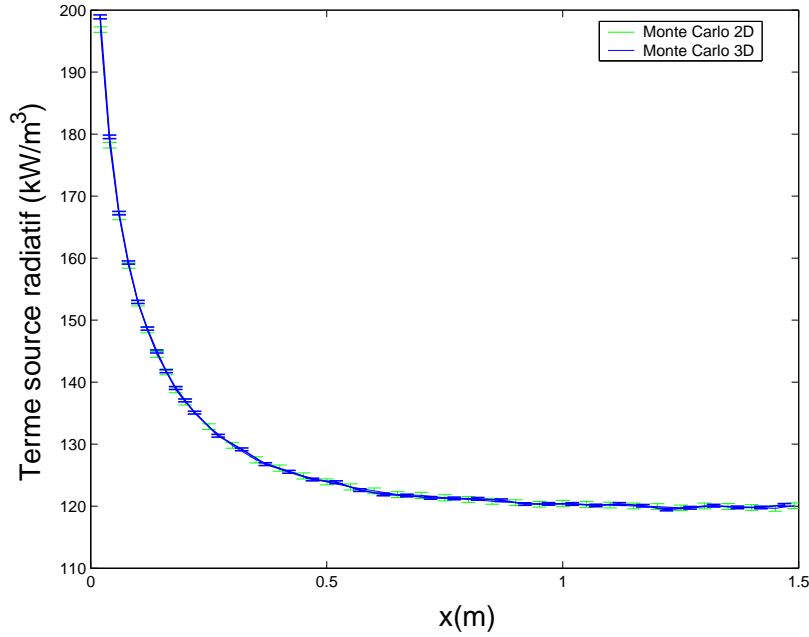


FIG. 5.12 – Validation du code 3D en spectral par la comparaison avec le code cylindrique 2D.

dans une zone de volume, trop grands gradients de température ou de concentrations), la grille se raffine localement jusqu'à ce que la complexité soit en dessous du seuil fixé par l'utilisateur, ou que la profondeur maximum de récursivité soit atteinte (à la fin de la subdivision, la grille est composée de voxels de différentes tailles). Ainsi, la grille s'étant raffinée le plus aux endroits les plus complexes, on peut reconnaître la forme du four sur la figure 5.13, et on peut voir que la plus grande partie (en volume) de la grille accélératrice est en fait vide.

A ce stade, nous voudrions bien préciser que les voxels obtenus, ne représentent en aucune manière une approximation de la géométrie, à la différence d'un maillage de mécanique des fluides où mailles et géométrie sont totalement confondues. Les voxels ne représentent qu'un découpage de l'espace en zones homogènes (les critères d'homogénéité étant définis par l'utilisateur <sup>3</sup>) et peuvent contenir des éléments de description géométriques (par exemple un ensemble de facettes).

Nous effectuons le calcul du bilan monochromatique dans le four à une longueur d'onde de  $10\mu\text{m}$  en déplaçant un point de mesure le long de l'axe  $x$  (Fig. 5.14). Les températures de parois sont uniformes pour chaque paroi, mais différentes d'une paroi à l'autre et peuvent être consultées dans le fichier de description du four au format VRML (annexe C). Nous indiquons sur la figure 5.14 les températures des parois sur lesquelles nous faisons en même temps un calcul de sensibilité du bilan monochromatique aux températures de parois (le principe général du calcul de sensibilités aux paramètres du système par la méthode de Monte Carlo

<sup>3</sup>En combustion on utilisera des critères sur les gradients de température et de concentrations d'espèces.

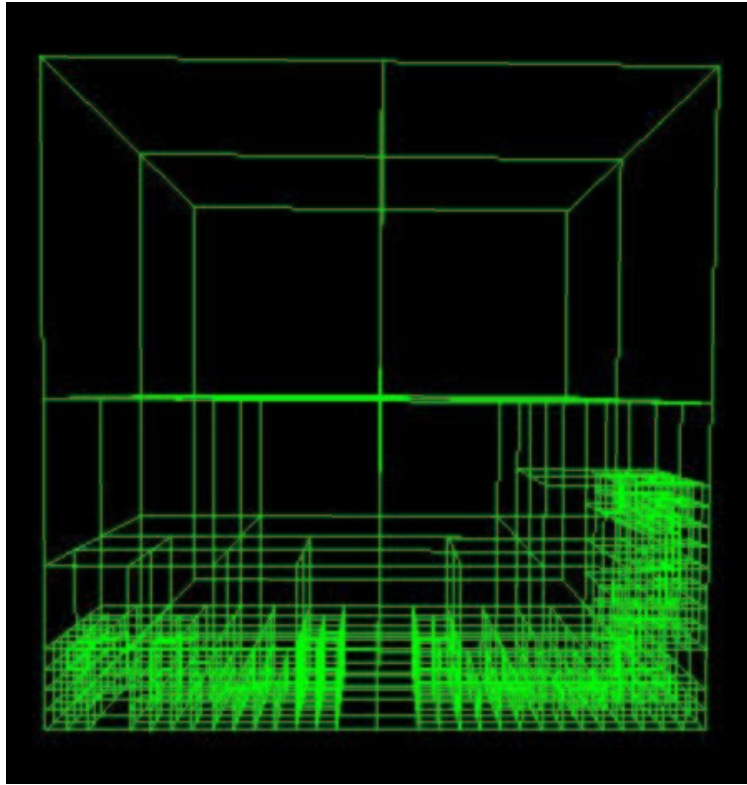


FIG. 5.13 – Découpage de l’espace de manière récursive. Application à une géométrie simplifiée de four (Fig. 5.2). Le nombre de subdivisions sur chaque axe est ici fixée à deux comme pour un octree, mais ce chiffre est laissé à la discrétion de l’utilisateur lors de la construction de la grille.

est exposé en annexe A). En particulier, on peut voir deux parois pour lesquelles nous avons indiqué une température de  $1900K$ . Elles correspondent dans notre modélisation grossière aux positions des brûleurs dans le modèle de four dont il est inspiré [Boineau et al., 2002].

Le bilan monochromatique (Fig. 5.15) est dominé par l’échange avec la paroi basse plus froide à  $1100K$  du four. Lors du déplacement du point de mesure, il est modulé par la proximité de parois plus chaudes, et parfois plus proches. On voit ainsi que l’échange entre le point et le système est plus faible dans les zones des brûleurs. Par contre, dans la zone d’étranglement intermédiaire l’échange est maximum non seulement car les parois environnantes sont alors plus froides, mais également plus proches. Ce comportement se reproduit dans la zone d’évacuation des fumées (côté des  $x$  grands, paroi jaune sur la figure 5.14).

Les sensibilités aux températures de parois (Fig. 5.16) dans ce cas monochromatique sont uniquement fonction de l’angle solide sous lequel le point de mesure voit chaque paroi. En particulier, la sensibilité à la température d’une paroi diminue de manière générale quand on

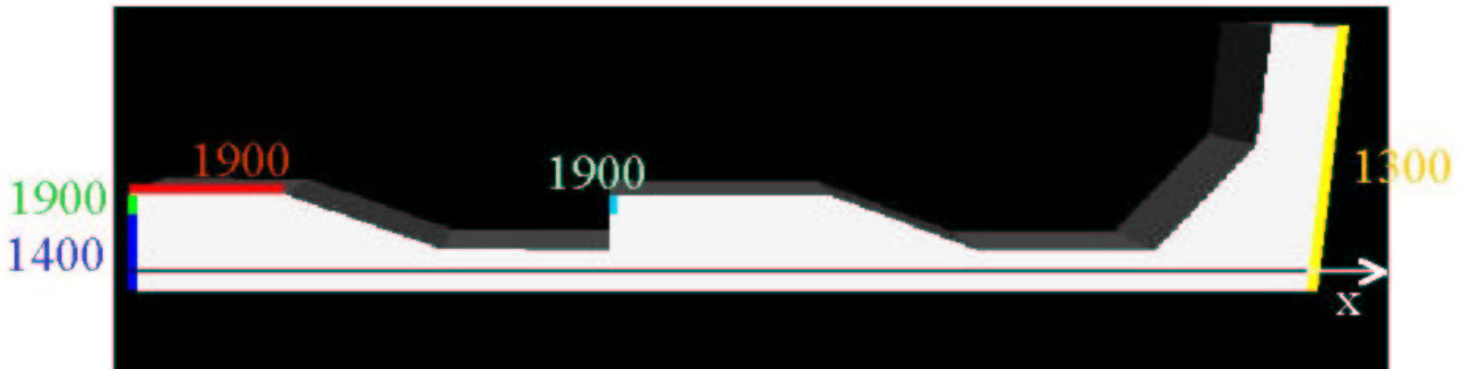


FIG. 5.14 – Application de l’algorithme de suivi de rayon à un cas monochromatique : évaluation du bilan monochromatique le long de l’axe  $x$  d’un four. On évalue en même temps les sensibilités aux parois du four dont les températures sont indiquées sur la figure.

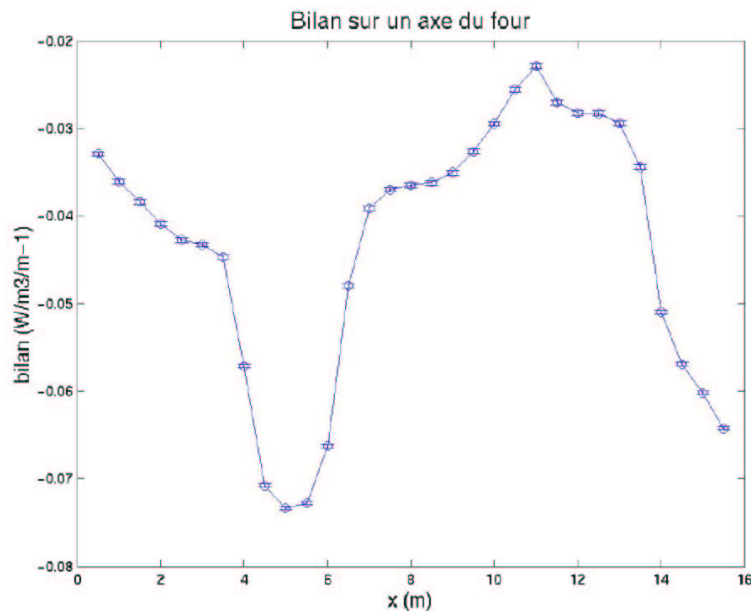


FIG. 5.15 – Bilan le long de l’axe du four.

s’éloigne de cette paroi pour devenir quasiment nulle quand le point de mesure est loin. Elle ne s’annule vraiment dans un cas sans diffusion, ni réflexion que si la paroi n’est plus visible directement du point de mesure, c’est à dire si aucun rayon tiré depuis le point de mesure ne peut atteindre directement la paroi à la température de laquelle on évalue la sensibilité. Nous avons introduit un motif répétitif dans la scène sous la forme des parois représentant les deux brûleurs. Il est ainsi intéressant de constater que les sensibilités aux températures de ces deux parois sont complètement similaires (Fig. 5.16), mais simplement décalées sur l’axe des mesures.

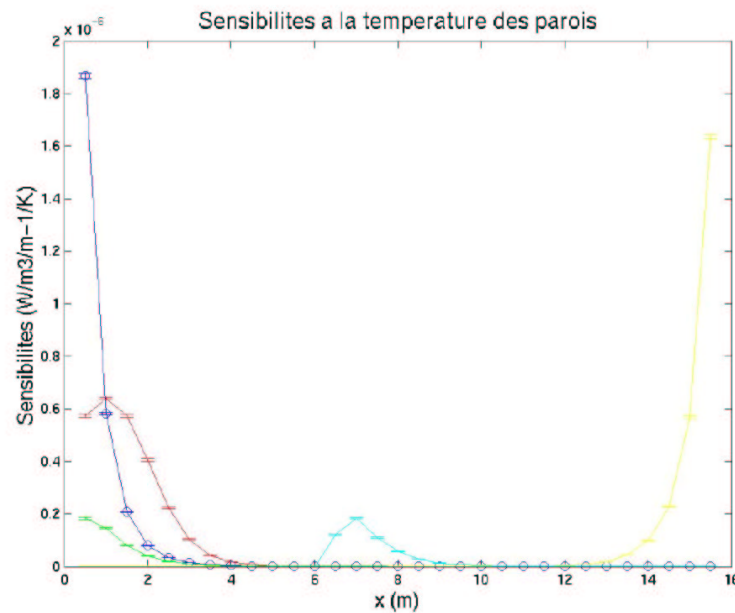


FIG. 5.16 – Sensibilités du bilan aux températures de parois.

### 5.6.3 Traitement d’un four issu d’une modélisation par AutoCad

Le four que nous représentons a été conçu pendant le travail de thèse de Yilmaz Kara [Kara, 2003] à l’école des mines d’Albi-Carmaux. Ce travail permet de mettre en œuvre une géométrie plus élaborée par rapport à l’exemple présenté précédemment. La représentation du four sous AutoCad a été réalisée à partir des plans de conception originaux. Il est composé d’une gaine qui a la forme d’un parallélépipède rectangle de dimensions suivantes :

- $2.9m$  sur l’axe  $x$
- $0.36m$  sur l’axe  $y$
- $0.294m$  sur l’axe  $z$

ainsi que d’un brûleur dont la géométrie est complexe (Fig 5.17(a)). Le brûleur comprend une partie cylindrique à laquelle sont rattachées deux plaques percées (Figs 5.17(b), et 5.17(c)). C’est le brûleur qui fait toute la complexité géométrique de la scène, car il est formé par 100352 des 100376 polygones décrivant la géométrie de la gaine après conversion du fichier AutoCad au format VRML. La partie cylindrique injecte du méthane dans la gaine. Un mélange d’air et de  $COV$  provenant de la zone située à gauche du brûleur sur la figure 5.17, est dirigé sur le brûleur par des plaques perpendiculaires à l’axe  $x$  faisant office de diaphragme (la vitesse du mélange est alors accélérée). Il rencontre le méthane après être éventuellement passé par les trous des plaques percées du brûleur (ceci permet d’étager la combustion et de produire moins de  $NO_x$ ).

La figure 5.17(d) représente la grille que nous utilisons (5 subdivisions sur chaque axe, et récursivité de profondeur 3) pour le calcul du terme source radiatif dans ce four. Nous

sommes donc confrontés à un système dont la géométrie est très simple dans la plus grande partie, mais présente une forte complexité en terme de nombre de facettes dans une zone de volume réduite devant l'échelle du four.

De plus, nous avons introduit les paramètres physiques résultant de mesures sur le four réel en conditions de fonctionnement. La figure 5.18 montre les profils de température introduits comme paramètres d'entrée du calcul. Ils sont considérés comme ne présentant pas de variation suivant l'axe  $z$ . Les profils de concentrations ne sont pas indiqués ici car nous ne disposons par pour l'instant de données précises dans ce domaine. Nous pouvons néanmoins indiquer que les espèces rayonnantes considérées ici sont  $H_2O$  et  $CO_2$  en concentrations relativement homogènes sur des échelles de  $30cm$  à  $40cm$  et de l'ordre de 1% à 3% pour chacune d'elles. Nous calculons alors le terme source radiatif volumique pour une série de points centrés en  $z$  dans le système. Une première série montre l'évolution du terme source radiatif le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0.18m$  (centré en  $y$ ) (Fig 5.19(a)). Le terme source radiatif volumique diminue quand on s'éloigne de la zone du brûleur, qui est aussi la zone de formation de la flamme et réchauffe donc le reste du milieu.

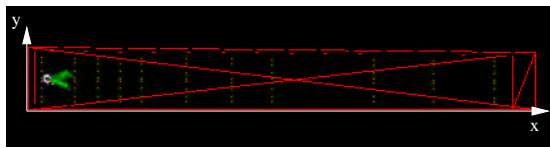
La deuxième série est faite suivant l'axe  $y$  pour  $x = 0.24m$  (proche du brûleur) (Fig 5.19(b)). Là encore, le terme source est plus fort quand le point de mesure est situé le plus près du brûleur. Un fort échange net se produit également dans une zone située entre le brûleur et les parois, où il y a une circulation de gaz frais (mélange air + COV).

Le nombre de rayons utilisés pour les calculs des termes sources de long de l'axe  $y$  est de 100000 par point, pour un écart type allant de 0.5% à 2.4%. Les temps de calcul associés varient entre 30s et 50s sur un pentium 4, 1.7GHz. Un calcul fait sur une maille avec notre code 2D cylindrique (basé sur une programmation classique) pour le même nombre de rayons, conduit à des temps de calcul de l'ordre de 20s sur la même machine. A titre de comparaison, le cylindre utilisé dans ce cas par le code 2D est composé de 18 éléments de surface, alors que la gaine du four d'incinération de COV traitée par le code 3D contient plus de 100000 éléments géométriques. Cela peut donner une idée des bénéfices, en termes de temps de calcul, d'une approche de synthèse d'images pour l'évaluation des termes sources radiatifs dans des systèmes de combustion réels.

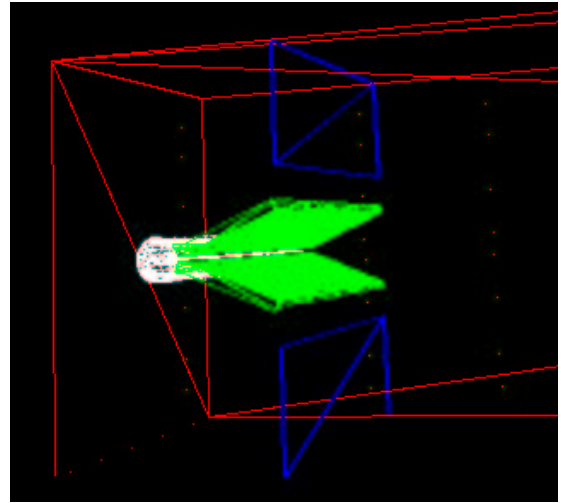
Pour les calculs de termes sources le long de l'axe  $x$ , nous gardons le même nombre de tirages. Les écart types associés restent faibles tant que le point de calcul est situé près du brûleur (ils sont inférieurs à 1% jusqu'à  $x = 1.125m$ ). Puis ils augmentent progressivement jusqu'à atteindre 27% pour le dernier point de calcul ( $x = 2.71m$ ). Ceci peut être expliqué par le fait que toute la complexité géométrique est très localisée, et se trouve dans la zone du brûleur. Alors, pour un point de calcul éloigné de cette zone (ce qui a été le cas des points représentés sur la figure 5.19(a) aux valeurs de  $x$  les plus élevées), la plus grande partie des rayons est dirigée vers les zones les plus simples au point de vue géométrique de cette gaine d'incinération de COV de forme allongée. A l'inverse, relativement peu de rayons ont atteint la zone du brûleur. Ainsi, la zone la plus complexe est mal échantillonnée pour des points de calcul éloignés. Un meilleur échantillonnage de cette zone pourrait résulter, sans augmentation du nombre de tirages (et donc sans augmentation du temps de calcul), d'un

---

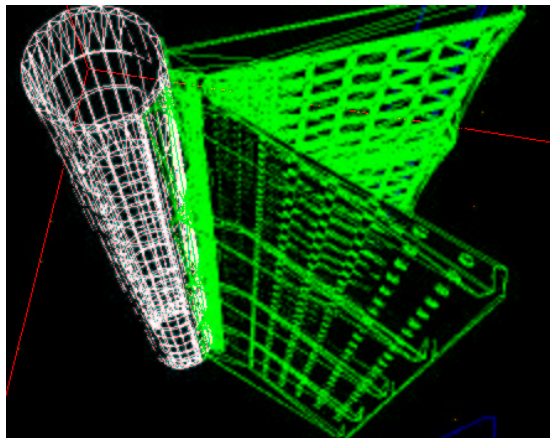
choix directionnel d’émission des rayons, au moyen par exemple d’une fonction de phase du type de celles utilisées dans les problèmes de diffusion.



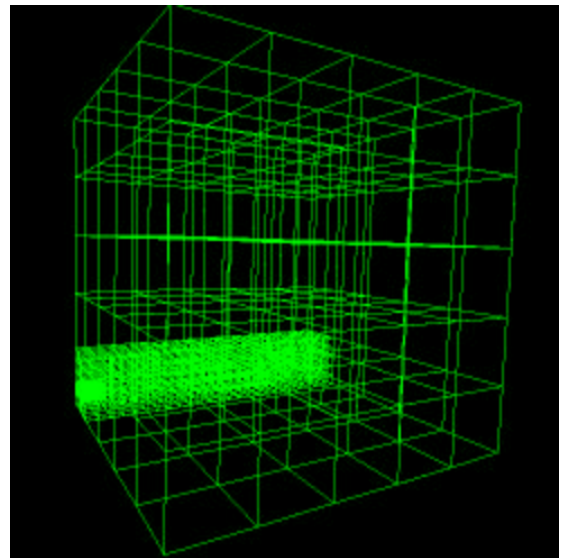
(a) Modélisation d'un four d'incinération de COV (représentation filaire de l'ensemble de la gaine).



(b) Zoom sur la zone du brûleur du four d'incinération de COV.



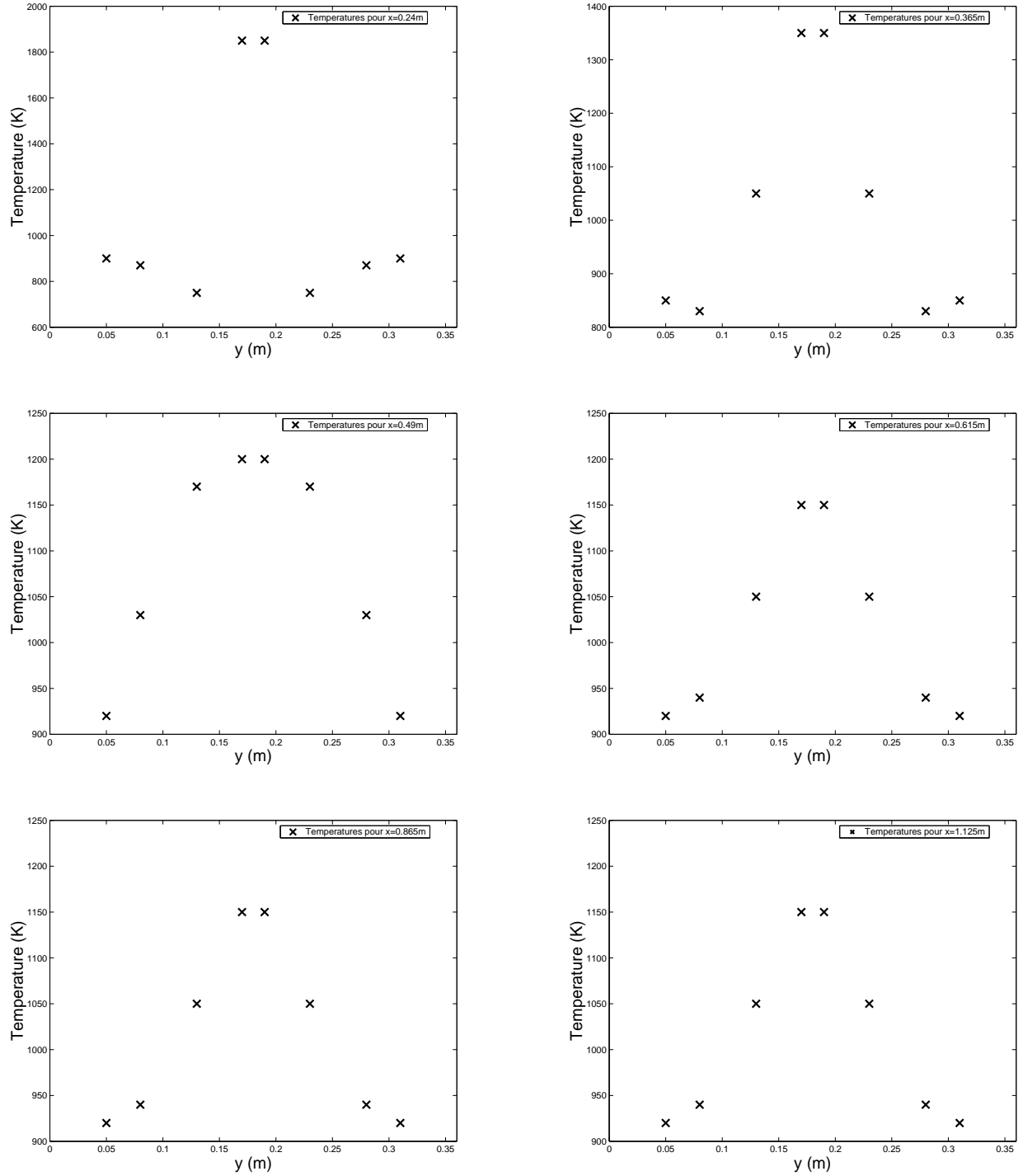
(c) Zoom sur la zone du brûleur du four d'incinération de COV. Il est constitué par un élément cylindrique et deux plaques percées de trous.

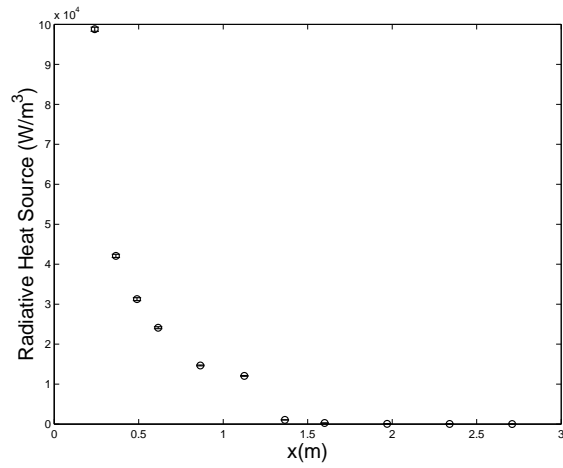


(d) Construction de la grille d'accélération du suivi des rayons.

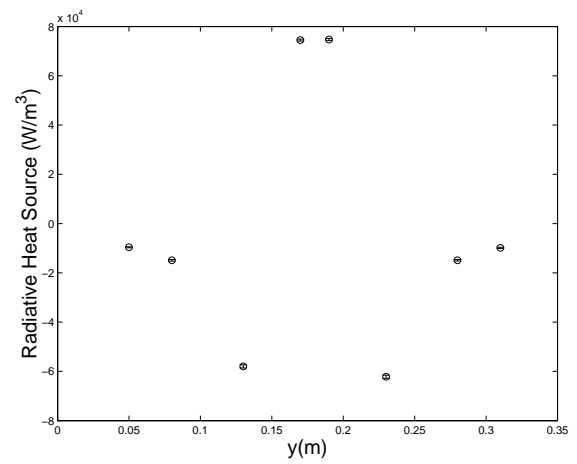
FIG. 5.17 – Modélisation d'un four d'incinération de COV et construction de la grille d'accélération de suivi des rayons. Le maillage se raffine dans les zones de forte complexité géométrique et de forts gradients de températures et de concentrations. Ces zones sont situées à proximité du brûleur.



FIG. 5.18 – Champ de températures du four d'incinération de *COV*.



(a) Termes sources radiatifs suivant l'axe  $x$  du four. Résultats de simulation avec 100000 rayons lancés par point de calcul.



(b) Termes sources radiatifs suivant l'axe  $y$  du four. Résultats de simulation avec 100000 rayons lancés par point de calcul.

FIG. 5.19 – Exemple de calculs de termes sources radiatifs dans un four issu d'une modélisation par AutoCad.

# Chapitre 6

## Conclusion

Il existe pour le transfert radiatif des solutions de références auxquelles on peut confronter les différents modèles utilisés pour résoudre les problèmes de transfert de chaleur par rayonnement. Ces solutions de référence sont calculées pour des configurations simples sur le plan géométrique et/ou spectral. Lorsqu'on est confronté au choix d'une méthode pour l'appliquer à une enceinte de combustion réelle, la démarche usuelle consiste à déterminer d'abord quelle est la configuration la plus proche des conditions de l'enceinte réelle, et pour laquelle on possède (ou pour laquelle on peut produire) une solution de référence. Alors les différents modèles et méthodes sont testés sur cette solution de référence. Celui qui donne les meilleurs résultats est appliqué directement au cas réel plus complexe. Il y a pourtant une grosse inconnue sur les effets de l'augmentation de la complexité sur la validité des résultats ainsi obtenus, mais il n'existe pas pour l'heure, à notre connaissance, d'outil capable de répondre efficacement au problème de la production de solutions de contrôle sur des géométries telles que celles auquel l'ingénieur est aujourd'hui confronté en phase de dimensionnement, ne serait-ce qu'en quelques points du système.

Face à ce constat, lié à la combinaison de complexités géométriques et spectrales nous avons retenu l'option suivante : celle d'une méthode statistique comme la méthode de Monte Carlo dont l'efficacité relative croît avec la complexité par rapport aux solutions déterministes. Sur cette base nous avons conçu un outil intégrant, d'une part des développements récents sur la formulation de l'équation de transfert radiatif et l'optimisation des tirages aléatoires, et d'autre part des techniques inspirées des recherches en synthèse d'images en ce qui concerne la représentation de la géométrie et l'optimisation du suivi des rayons lumineux. Cet outil a pour but de répondre au problème précédemment évoqué : la production de solutions de référence en quelques points d'un système réel faisant intervenir une géométrie complexe et des spectres de gaz. Ses performances lui permettent d'être utilisé en parallèle des solveurs radiatifs usuels plus rapides. Il s'agit au final d'aller vers une alternative à la démarche usuelle de validation des méthodes approchées sur des configurations académiques seulement, suivie d'une mise en œuvre immédiate en situation réelle.

Dans cette logique, nous n'avons pas pour l'instant porté notre effort sur les phénomènes de diffusion du rayonnement, dont la prise en compte est sans doute nécessaire pour de nombreux procédés à haute température (présence de grosses particules volantes dans des

incinérateurs, synthèse de nano-particules, etc), mais des travaux sont en cours sur l'étude de ces phénomènes au sein de nos équipes de recherches (thèse de Vincent Eymet sur les phénomènes de diffusions atmosphériques, thèse de Maxime Roger sur la diffusion dans les géométries complexes et le développement des sensibilités à la géométries, thèse de Cyril Caliot sur les phénomènes de diffusion par des particules métalliques).

Nous avons évoqué à plusieurs reprises les possibilités offertes par le choix de la méthode de Monte Carlo en termes d'analyse et de dimensionnement à travers le calcul systématique de matrices de sensibilités. Ce point a été illustré sur un modèle de four, sans insister sur les possibilités d'exploitation de ce potentiel dans une démarche d'optimisation des systèmes. C'est un domaine d'exploitation de la méthode de Monte Carlo qui présente un intérêt réel et constitue un apport supplémentaire à la production de points de contrôle. Il reste sans doute beaucoup de travail à fournir dans ce domaine, notamment dans la détermination des sensibilités pertinentes à calculer et dans l'interprétation de celles-ci. Cette voie ouvre des questions pour l'instant à l'état embryonnaire sur l'estimation des sensibilités à la géométrie, dont on voit aisément les intérêts ; par exemple : comment déplacer une paroi pour obtenir un flux pariétal donné, ou comment déplacer une source de lumière pour avoir un éclairage donné en un point précis ? Ce type de démarche est prometteur et pourrait constituer une étape consécutive à mon travail de thèse.

De plus, une question logique s'impose maintenant : celle d'utiliser les mêmes techniques d'optimisation pour aborder directement le problème du couplage du transfert radiatif à la mécanique des fluides, ainsi qu'aux autres phénomènes présents dans les enceintes de combustion. Le pas à franchir est important entre le calcul de solutions en quelques points, et l'évaluation du terme source radiatif en chaque nœud d'un maillage de mécanique des fluides. La solution se trouve certainement dans la possibilité de calculs de sensibilités (voire de dérivées aux ordres supérieurs), ainsi que dans le découplage des grilles de calcul pour la CFD et pour le rayonnement, ce second point posant malheureusement des questions d'interpolations qui restent difficiles à aborder. Ce travail ne pourra s'effectuer qu'en collaboration étroite avec des spécialistes de mécanique des fluides.

Enfin, et par manque de temps, nous n'avons pas réalisé d'images de synthèse infra-rouge incluant des spectres de gaz. C'est pourtant une possibilité quasi-immédiate de notre outil dans la mesure où il reprend des algorithmes de synthèse d'images. Cela sera fait prochainement, peut-être en testant les possibilités de parallélisation du calcul. Cela offrira en particulier la possibilité d'obtenir un résultat de type caméra infra-rouge tel que ceux utilisés dans certaines méthodes de diagnostic et de contrôle automatique de procédés.

# Table des figures

1.1	Comparaison entre flux convectif et radiatif pour le flux de chaleur à la paroi.	19
1.2	Flamme de diffusion 1D. . . . .	20
1.3	Comparaison entre flux convectif et radiatif pour une flamme de diffusion. .	20
1.4	Influence du rayonnement sur la température de la flamme. . . . .	21
1.5	Influence de la température de la flamme sur la production d'oxydes d'azote.	22
1.6	Rayonnement d'un mélange de gaz et de suie à température $T=1000K$ . . . .	23
1.7	Rayonnement d'un mélange de gaz et de suie à température $T=2000K$ . . . .	24
1.8	Démarche générale de la thèse. . . . .	27
1.9	Problématique en synthèse d'images. . . . .	28
2.1	Découpage du spectre suivant la longueur d'onde. . . . .	30
2.2	Exemple de spectre de gaz en émission. . . . .	31
2.3	Exemple de spectre de gaz en absorption. . . . .	31
2.4	Quantification des niveaux d'énergie dans une molécule. . . . .	32
2.5	Profil de raie Doppler et Lorentz pour une même demi-largeur à mi-hauteur $\gamma = 0.0125cm^{-1}$ . . . . .	35
2.6	Flux de photons incidents sur une distribution homogène de molécules. . . .	36
2.7	Courbe du corps noir. . . . .	39
2.8	Définition de la luminance. . . . .	40
2.9	Propagation d'un rayon lumineux dans un milieu participant. . . . .	42
2.10	Rôle du paramètre de forme dans la transmittivité moyenne. . . . .	49
2.11	Spectre synthétique d'absorption. . . . .	52
2.12	Fonction de Domoto. Le coefficient d'absorption est réorganisé sur une bande étroite . . . . .	52
2.13	Validité de la méthode ck. Les raies évoluent de manière simultanée et identique en fonctions des paramètres extérieurs. . . . .	54
2.14	fonction de répartition de $\kappa$ . . . . .	55
2.15	Efficacité de la méthode d'intégration de Monte Carlo pour un problème complexe. . . . .	60
3.1	Fonctions de correspondance des couleurs définies par la CIE. On voit notamment que le rouge participe à la perception du bleu. . . . .	62
3.2	Différence entre couleurs perceptibles et couleurs représentables dans une base RVB. . . . .	63

3.3	Rendu d'une scène en utilisant soit des calculs spectraux, soit des calculs dans une base RVB. Cette image a été produite par Luc Claustre de l'équipe synthèse d'images de l'IRIT. . . . .	64
3.4	Modèle d'illumination de Phong . . . . .	65
3.5	Illustration du calcul de radiosité entre deux surfaces $S_i$ et $S_j$ . . . . .	68
3.6	Calcul de l'illumination globale par lancé de rayons. . . . .	69
3.7	Tracé de chemin inverse. . . . .	70
4.1	Découpage du système en zones d'échanges : volumes et surfaces. . . . .	83
4.2	Tirage d'un point d'émission sur une surface : cas du rectangle . . . . .	92
4.3	Tirage d'un point d'émission sur une surface : cas d'une couronne. . . . .	92
4.4	Tirage d'une direction d'émission sur une surface quelconque. . . . .	94
4.5	Génération d'un rayon à partir de l'enveloppe de la maille dans un cas mono-dimensionnel. . . . .	94
4.6	Inadéquation de l'algorithme 1D à un cas multi-D. . . . .	95
4.7	Influence de la procédure de génération d'un point d'émission en fonction de l'épaisseur optique pour différentes géométries. . . . .	96
4.8	Tirage d'une direction d'émission dans un volume. . . . .	98
4.9	Echange entre un volume et une surface. Exemple d'évaluation d'un échange par la méthode de Monte Carlo. . . . .	103
4.10	Système de mailles cylindriques imbriquées. . . . .	108
4.11	Le système de coordonnées est attaché à chaque rayon et dépend de la surface par laquelle il sort de la maille d'émission. . . . .	109
4.12	Comparaison du code cylindrique 2D au code d'origine en se ramenant à une configuration 1D. . . . .	111
4.13	Comparaison avec un code Monte Carlo indépendant adapté à des géométries cartésiennes [Clergent, 2000]. . . . .	112
4.14	Comparaison entre Monte Carlo et Ray Tracing. . . . .	113
4.15	Comparaison entre Monte Carlo et Ray Tracing. . . . .	114
5.1	Diagramme schématique de construction de la solution. . . . .	117
5.2	Géométrie représentant un four de type industriel. . . . .	119
5.3	Voxel. . . . .	119
5.4	Techniques d'accélération pour le lancé de rayons [Arvo and Kirk, 1989] . . .	120
5.5	Volumes englobants. Un objet géométriquement complexe est délimité par une forme plus simple. On peut définir plusieurs niveaux de volumes englobants. . .	121
5.6	Exemple de subdivision récursive de l'espace. . . . .	122
5.7	Arborescence représentant la structure d'un quadtree . . . . .	123
5.8	Découpage de l'espace suivant un BSP tree. . . . .	124
5.9	Discrétisation d'une scène 2D. . . . .	125
5.10	Algorithme de traversée de grille rapide. . . . .	126
5.11	Evaluation des intersections. . . . .	127
5.12	Validation du code 3D en spectral par la comparaison avec le code cylindrique 2D. . . . .	130

---

5.13	Découpage de l'espace de manière récursive. Application à une géométrie simplifiée de four (Fig. 5.2). . . . .	131
5.14	Application de l'algorithme de suivi de rayon à un cas monochromatique : évaluation du bilan monochromatique le long de l'axe $x$ d'un four. . . . .	132
5.15	Bilan le long de l'axe du four. . . . .	132
5.16	Sensibilités du bilan aux températures de parois. . . . .	133
5.17	Modélisation d'un four d'incinération de COV et construction de la grille d'accélération de suivi des rayons. . . . .	136
5.18	Champ de températures du four d'incinération de COV. . . . .	137
5.19	Exemple de calculs de termes sources radiatifs dans un four issu d'une modélisation par AutoCad. . . . .	138





# Bibliographie

- J. Abraham and V. Magi. Application of the discrete ordinates method to compute radiant heat loss in a diesel engine. *Numerical heat transfer, Part A*, 31(6) :597–610, 1997.
- J. Amanatides and A. Woo. A fast traversal algorithm for ray tracing. *Eurographics*, pages 3–10, August 1987.
- A. Appel. Some techniques for shading machine renderings of solids. In *AFIPS 1968, Spring Joint Computer conf.*, volume 32, pages 37–45, 1968.
- D. Arques, S. Michelin, and B. Piranda. Extension de la méthode zonale aux réflexions spéculaires. In *5èmes journées de l'association française d'informatique graphique AFIG 1997 Rennes*, pages 309–318, Décembre 1997.
- D. Arquès, S. Michelin, and S. Azarian. Extension de la radiosité classique aux milieux semi-transparents : développements mathématiques pour la méthode zonale. *Revue internationale de CFAO et d'informatique graphique*, 11(1-2) :91–109, 1996.
- J. Arvo and D. Kirk. Fast ray tracing by ray classification. *Computer Graphics*, 21(4) : 55–64, 1987.
- J. Arvo and D. Kirk. *A Survey of Ray Tracing Acceleration Techniques*, in *An Introduction to Ray Tracing*, pages 201–262. Academic Press, San Diego, 1989.
- S. Bicocchi. *Les polluants et les techniques d'épuration des fumées*. Lavoisier TEC et DOC, 1998.
- P. Boineau, C. Copin, and F. Aguille. Heat transfer modelling using advanced zone modelbased on a cfd code. In *6th European conference on industrial furnaces and boilers, Estoril-Lisbon-Portugal*, April 2002.
- R. Borghi and M. Destriau. *La combustion et les flammes*. Technip, 1995.
- N.W. Bressloff. The influence of soot loading on weighted sum of grey gases solutions to the radiative transfer equation across mixtures of gases and soot. *International Journal of Heat and Mass transfer*, 42(18) :3469–3480, 1999.
- N.W. Bressloff, J.B. Moss, and P.A. Rubini. Differential total absorptivity solution to the radiative transfer equation for mixtures of combustion gases and soot. *Numerical heat transfer, Part B*, 31 :43–60, 1997.

- K.M. Case and P.F. Zweifel. *Linear Transport Theory*. 1967.
- S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Clarendon Press, 1950.
- M. Cherkaoui. Modelisation et etude de sensibilité des échanges radiatifs et conductifs couples en cavité remplie d'air ambiant. *These de l'Universite de Paris XII*, 1993.
- M. Cherkaoui, J-L. Dufresne, R. Fournier, J-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Monte Carlo simulation of radiation in gases with a narrow-band model and a net-exchange formulation. *Journal of Heat Transfer*, 118 :401–407, 1996.
- R.S. Chhikara and J.L. Folks. *The Inverse Gaussian Distribution*. Marcel Dekker, Inc., 1989.
- CIE. Colorimetry, official recommendations of the international commission on illumination. *CIE Publication*, 15, 1971.
- CIE. Recommendations on uniform color spaces-color difference equations, psychometric color terms. *CIE Publication*, 15, 1978.
- L. Claustres, M. Paulin, and Y. Boucher. Brdf measurement modelling using wavelets for efficient path tracing. *to appear in Computer Graphics Forum*, ??(??), 2003.
- Y. Clergent. *Influence du rayonnement thermique sur les écoulements de convection naturelle en espace confiné*. PhD thesis, Université Paul Sabatier - Toulouse, 2000.
- P.J. Coelho and M.G. Carvalho. Evaluation of a three-dimensional mathematical model of a power station boiler. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118 :887–895, October 1996.
- P.J. Coelho, P. Perez, and M. El Hafi. Benchmark numerical solutions for radiative heat transfer in two-dimensional axisymmetric enclosures with non-gray sooting media. *accepted for publication in Numerical Heat Transfer Part B*, Submitted in 2002.
- R.L. Cook, T. Porter, and L. Carpenter. Distributed ray tracing. *Computer Graphics, Proceedings of SIGGRAPH'84*, 18(3) :165–174, 1984.
- M. Costa, M. Mourao, J. Baltasar, and M.G. Carvalho. Combustion measurements in an industrial glass-melting furnace. *journal of the Institute of Energy*, 69 :80–86, June 1996.
- W. H. Dalmaz and A. F. Sarofim. Optical constants of soot and their application to heat-flux calculations. *Journal of Heat Transfer*, 52 :100–104, 1969.
- Amaury de Guilhem de Lataillade. *Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans des systèmes en combustion*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2001.
- A. de Lataillade, S. Blanco, Y. Clergent, J.L. Dufresne, M. El Hafi, and R. Fournier. Monte Carlo method and sensitivity estimations. *accepted for publication in Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002a.

- A. de Lataillade, J.L. Dufresne, M. El Hafi, V. Eymet, and R. Fournier. A net exchange Monte Carlo approach to radiation in optically thick systems. *accepted for publication in Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002b.
- J. Delfosse. *Le Rendu Discret : Voxélisation, Structures Spatiales et Améliorations*. PhD thesis, Université de Poitiers, 1996.
- M.K. Denison and B.W. Webb. A spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary rte solvers. *Transactions of the ASME*, 115 :1004–1012, 1993.
- G.A. Domoto. Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : the inverse transmission function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 14 :935–942, 1974.
- J-L. Dufresne, R. Fournier, and J-Y. Grandpeix. Méthode de Monte Carlo par échanges pour le calcul des bilans radiatifs au sein d’une cavité 2d remplie de gaz. *Compte-Rendu Académie des Sciences*, 326 :33–38, 1998.
- J-L. Dufresne, R. Fournier, and J-Y. Grandpeix. Inverse gaussian k-distributions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61 :433–441, 1999.
- P. Dutre. *Mathematical frameworks and Monte Carlo algorithms for global illumination in computer graphics*. PhD thesis, Université Catholique de Louvain - Belgique, 1996.
- E.R.G. Eckert and R.M. Drake. *Heat and Mass Transfer*. McGraw-Hill, New York, 1959.
- V. Eymet, A.M. Brasil, M ElHafi, T.L. Farias, and P.J. Coelho. Numerical investigation of the effect of soot aggregation on the radiative properties in the infrared region and radiative heat transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 74 : 697–718, 2002.
- J.T. Farmer. *Improved Algorithms for Monte Carlo Analysis of Radiative Heat Transfer in Complex Participating Media*. PhD thesis, The University of Texas at Austin, 1995.
- W.A. Fiveland. Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal of Heat Transfer*, 106 :699–706, 1984.
- W.A. Fiveland. D.o.m.for radiative heat transfer in isotropically and anisotropically scattering media. *Journal of Heat Transfer*, 109 :809–812, 1987.
- W.A. Fiveland. Three-dimensional radiative heat transfer solutions by the discrete-ordinates method. *J. Thermophysics*, 2(4) :309–316, 1988.
- W.A. Fiveland and A.S. Jamaluddin. Three-dimensional spectral radiative heat transfer solutions by the discrete-ordinates method. *J. Thermophysics*, 5(3) :335–339, 1991.
- W.A. Fiveland and J.P. Jessee. Comparison of dom formulations for radiative heat transfer in multidimensional geometries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(1) :47–54, 1995.

- R. Fournier. Rayonnement thermique dans les gaz : analyse de couplage avec la convection naturelle. *These de l'Universite Paul Sabatier*, 1994.
- A. Fujimoto, T. Tanaka, and K. Iwata. Arts : Accelerated ray-tracing system. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 6(4) :16–26, April 1986.
- A.S. Glassner. *An Introduction to Ray Tracing*. Academic Press, San Diego, 1989.
- T.H. Gogel, A. Sedghinasab, and D.R. Keefer. Radiation transfer computation in cylindrical arc columns using a monte carlo method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 52(2) :179–194, 1994.
- Y. Goody. *Atmospheric Radiation theoretical basis*. 1989.
- C.M. Goral, K.E. Torrance, D.P. Greenberg, and B. Bataille. Modeling the interactions of light between diffuse surfaces. *Computer Graphics*, 18(3) :213–222, 1984.
- J.S.A. Green. Division of radiative streams into internal transfer and cooling to space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 93 :371–372, 1967.
- L.A. Gritz, R.D. Skocypec, and T.W. Tong. The use of high-performance computing to solve participating media radiative heat transfer problems. Technical report, NSF Workshop, Sandia Report SAND95-0225, 1995.
- J.M. Hammersley and D.S. Handscomb. *Monte Carlo Methods*. 1967.
- P. Hanrahan and W. Krueger. Reflection from layered surfaces due to subsurface scattering. In *Proceedings of SIGGRAPH 1993 Annual Conference*, pages 165–174, 1993.
- V. Havran and J. Bittner. Lcts : Ray shooting using longest common traversal sequences. In M. Gross and F.R.A. Hopgood (Guest Editors), editors, *Eurographics 2000*.
- V. Havran and W. Purgathofer. Comparison methodology for ray shooting algorithms. Technical report, Institute of Computer Graphics and Algorithms, Vienna University of Technology, 2000.
- Xiao D. He, Kenneth E. Torrance, Francois X. Sillion, and Donald P. Greenberg. A Comprehensive Physical Model for Light Reflection. In *Computer Graphics (ACM SIGGRAPH '91 Proceedings)*, volume 25, pages 175–186, July 1991.
- P.S. Heckbert. Adaptive radiosity textures for bidirectional ray tracing. *Computer Graphics (Proceedings of SIGGRAPH'90)*, 24(4) :145–154, August 1990.
- H.C. Hottel and A.F. Sarofim. The effect of gas flow patterns on radiative transfer in cylindrical furnaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 8, 1965.
- H.C. Hottel and A.F. Sarofim. Radiative transfer. *McGraw-Hill Book Company*, 1967.
- E. Iacona, O. Penanhoat, Ph. Picot, O. Guignard, and J. Taine. Radiation transfer modelling by a ray-tracing method and a ck or k approach. In *12th International Heat Transfer Conference*, 2002.

- F. James. RANLUX : A Fortran implementation of the high-quality pseudorandom number generator of Luscher. *Computer Phys. Commun.*, 79 :111–114, 1994.
- H.W. Jensen. *Realistic Image Synthesis Using Photon Mapping*. 2001.
- J. Kajiya. The rendering equation. *Computer Graphics*, 20(4) :143–150, August 1986.
- M.R. Kaplan. Space-tracing a constant time ray-tracer. In *Proceedings of SIGGRAPH Conference*, volume 19, 1985.
- Y. Kara. *Oxydation thermique des composés organiques volatils en épurateur récupératif : optimisation des outils de dimensionnement*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- A. Khalfi. *Etude du comportement dans diverses conditions de combustion, de déchets de bois, représentatifs de la filière ameublement*. PhD thesis, Université de Haute-Alsace, 2000.
- T.K. Kim, J.A. Menart, and H.S. Lee. Nongray radiative gas analyses using the s-n discrete ordinates method. *Journal of Heat Tranfert*, 113 :946–952, 1991.
- E.P. Lafortune and Y.D. Willems. Bidirectional path tracing. In *Compugraphics'93*, pages 95–104, 1993.
- E.P. Lafortune and Y.D. Willems. A 5d tree to reduce the variance of monte carlo ray tracing. In *Rendering techniques - 6th Eurographics conference Dublin June 1995*, pages 11–20, June 1995.
- E.P. Lafortune and Y.D. Willems. Rendering participating media with bidirectional path tracing. In *Proceedings of the 7th Eurographics Workshop on Rendering, Porto, Portugal*, pages 92–101, June 1996.
- P. Lalonde and A. Fournier. A wavelet representation of reflectance functions. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 3(4) :329–336, August 1997. URL [citeseer.nj.nec.com/113293.html](http://citeseer.nj.nec.com/113293.html).
- S.C. Lee and C.L. Tien. Optical constants of soot in hydrocarbon flames. *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 1159–1166, 1981.
- F. Liu, H.A. Becker, and Y. Bindar. A comparative study of radiative heat transfer modelling in gas-fired furnaces using the simple grey gas and wsgg models. *International Journal of Heat and Mass transfer*, 41(22) :3357–3371, 1998.
- S. Maeda and K. Ogawa. A proposal of a monte carlo method using octree structure. In *Nuclear science symposium*, volume 4, pages 1687–1690, 1995.
- W. Malkmus. Random lorentz band model with exponential-tailed s-1 line-intensity distribution function. *Journal of Optical Society of America*, 57 :323–329, 1967.
- M. Mbiok and R. Weber. *Radiation in Enclosures*. Springer-Verlag, 2000.

- M.P. Mengüç, R. Viskanta, and C.R. Ferguson. Multidimensional modeling of radiative heat transfer in diesel engines. *Society of Automotive Engineers Transactions*, (3) :3728–3745, 1985.
- M.P. Mengüç and R. Viskanta. Radiative transfer in three-dimensional rectangular enclosures containing inhomogeneous, anisotropically scattering media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 33(6) :533–549, 1985.
- M.P. Mengüç and R. Viskanta. A sensitive analysis for radiative heat transfer in a pulverized coal-fired furnace. *Combustion Science and Technology*, 51 :51–74, 1987.
- J.R. Michael, W.R. Schucany, and R.W. Haas. Generating random variables using transformation with multiple roots. *American Statistician*, 30 :88–90, 1976.
- Modest. *Radiative heat transfert*. Mc Graw-Hill Series in Mechanical Engineering, 1993.
- M.F. Modest. The wheighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer. *Journal of Heat Transfer*, 113(3) :650–656, 1991.
- B. Olsommer, M. von Spakovski, and D. Favrat. Transfert de chaleur par rayonnement dans un four d’incinération industriel : application de la methode des zones. *Revue Gen. Therm*, 36 :125–134, 1997.
- S. Osuwan. Mathematical simulation radiative heat transfer cylindrical test furnace. *Canadian journal of chemical engineering*, 50 :450–455, 1972.
- H.M Park, J.H. Lee, and J.H. Park. Analysis of spectral radiative heat transfer in furnaces using an efficient computational technique. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, (62) :459–475, 1999.
- S.N. Pattanaik and S.P. Mudur. Computation of global illumination by monte carlo simulation of the particle model of light. In *Proceedings of the 3rd Eurographics rendering workshop, Bristol*, 1992.
- S.N. Pattanaik and S.P. Mudur. Computation of global illumination in a participating medium by monte carlo simulation. *The journal of visualization nad computer animation*, 4(3) :133–152, 1993.
- B.T. Phong. Illumination for computer generated pictures. *Communication of the ACM*, 18 (6) :311–317, 1975.
- L. Pierrot, A. Soufiani, and J. Taine. Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in  $h_2o$ ,  $co_2$ , and  $h_2o - co_2$  mixtures at high temperature. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62 :523–548, 1999.
- W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T.Vetterling. *Numerical Recipes*. 1992.
- F. Pérez, I. Martin, and X. Pueyo. Acceleration of monte carlo path tracing in the presence of anisotropic scattering media. Technical report, Institut d’informàtica i aplicacions, Girona, Spain, 1999.

- F. Pérez, I. Martin, F.X. Sillion, and X. Pueyo. Acceleration of monte carlo path tracing in general environments. In *Pacific graphics*, 2000.
- F. Pérez, X. Pueyo, and F.X. Sillion. Global illumination techniques for the simulation of participating media. In *Rendering techniques - Eurographics*, volume 8, pages 309–320, June 1997.
- A. Rabl, J.V. Spadaro, and P.D. Mc Gavran. Effets sur la santé de la pollution atmosphérique due aux incinérateurs - une perspective. *Sciences et Techniques*, (9) :4–22, 1998.
- A.C. Ratzell and J.R. Howell. Two-dimensional radiation in absorbing-emitting media using the p-n approximation. *Journal of Heat Transfer*, 105 :333–340, May 1983.
- S. Rubin and T. Whitted. A three-dimensional representation for fast rendering of complex scenes. *Computer Graphics*, 14(3) :110–116, 1980.
- H. Rushmeier and K.E. Torrance. The zonal method for calculating light intensities in the presence of a participating medium. *Computer graphics*, 21(4) :293–302, July 1987.
- M. Sakami, A. Charette, and V. LeDez. Radiative heat transfer in 3-dimensional enclosures of complex geometry by using the discrete-ordinate method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 59 :117–136, 1998.
- D.H. Sampson. *Radiative Contributions to Energy and Momentum Transport in a gas*. Interscience Publishers, 1965.
- N. Selçuk and N. Kayakol. Evaluation of discrete ordinates method for radiative in rectangular furnaces. *International Journal for Heat and Mass Transfer*, 40 :213–222, 1997.
- R. Siegel and J. H. Howell. Thermal radiation heat tranfert. *Hemisphere publishing corporation, Third Edition*, 1992.
- F.X. Sillion and C. Puech. *Radiosity & Global Illumination*. Morgan Kaufman Publisher, 1994.
- T.F. Smith, Z.F. Shen, and J.N. Friedman. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. *Transactions of the ASME*, 104 :602–608, 1982.
- V.P. Solovjov and B.W. Webb. An efficient method for modeling radiative transfer in multi-component gas mixtures with soot. *Transactions of the ASME*, 123 :450–457, June 2001.
- A. Soufiani and J. Taine. Spectrally correlated radiative tansfer in real 3d axisymmetrical systems. In *Proceedings of the Sixth International Symposium on Transport Phenomena in Thermal Engineering, Seoul, Korea*, pages 185–190, 1993.
- A. Soufiani and J. Taine. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for  $h_2o$ ,  $co_2$  and  $co$ , and correlated-k model for  $h_2o$  and  $co_2$ . *Technical note in International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40 :987–991, 1997.

- J. Stam and E. Languénou. Ray tracing in non-constant media. In *Proceedings of the 7th Eurographics Workshop on Rendering, Porto, Portugal*, pages 225–234, June 1996.
- D.M. Stansel, N.M. Laurendeau, and D.W. Senser. Co and  $no_x$  emissions from a controlled-air burner : Experimental measurements and exhaust correlations. *Combustion Science and Technology*, 104 :207–234, 1995.
- F.R. Steward and P. Cannon. The calculation of radiative heat flux in a cylindrical furnace using the monte carlo method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 14 : 245–262, 1971.
- N. Stolte and R. Caubet. Discrete ray-tracing high resolution 3d grids. In *Computer graphics and visualisation - 3rd international conference*, volume 2, pages 300–312, February 1995a.
- N. Stolte and R. Caubet. discrete ray-tracing of huge voxel spaces. In *Eurographics' 95 : 16th annual conference of the european association for computer graphics*, volume 14, pages 383–394, 1995b.
- L. Szirmay-Kalos, V. Havran, B. Balazs, and L. Szecsi. On the efficiency of ray-shooting acceleration schemes. In *Proceedings of SCCG'02 conference*, pages 89–98, 2002.
- J. Taine and A. Soufiani. Gas ir radiatives properties : From spectroscopic data to approximate models. In *Advances in Heat Transfer*, volume 33, pages 295–414. 1999.
- Lionel Tessé. *Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo*. PhD thesis, École Centrale Paris, 2001.
- S.T. Thynell. Discrete-ordinates method in radiative heat transfer. *International Journal of Engineering Science*, 36 :1651–1675, 1998.
- J.S. Truelove. Discrete-ordinate solutions of the radiation transport equation. *Journal of Heat Transfer*, 109 :1048–1051, 1987.
- J.S. Truelove. Three-dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering in using the discrete-ordinates approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 39 :27–31, 1988.
- E. Veach. *Robust Monte Carlo methods for light transport simulation*. PhD thesis, Stanford university, 1997.
- W.G. Vincenti and C.H. Kruger Jr. *Introduction to Physical Gas Dynamics*. 1965.
- R. Viskanta and M.P. Mengüç. Radiation heat transfer in combustion systems. *Prog. Energy Combustion science*, 13 :97–160, 1987.
- J. Warnatz, U. Maas, and R.W. Dibble. *Combustion*. Springer-Verlag, 1996.
- H. Weghorts, G. Hooper, and D. Greenberg. Improved computational methods for ray tracing. *ACM Transactions on Graphics*, 3(1) :52–69.



- T. Whitted. An improved illumination model for shaded display. *Communications of the ACM*, 23 :343–349, 1980.
- G. Wyszecki and W.S. Stiles. *Color Science : Concepts and Mehods, Quantitative Data and Formulae*. Wiley-Interscience, 1982.
- W-J. Yang, H. Taniguchi, and K. Kudo. *Radiative heat transfer by the Monte-Carlo method*. Academic press, 1995.
- C.N. Zeeb, J.S. Dolaghan, and P.J. Burns. An efficient monte carlo particle tracing algorithm for large, arbitrary geometries. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 39 :325–344, 2001.
- L. Zhang, A. Soufiani, and J. Taine. Spectral correlated and non-correlated radiative tranfer in a finite axisymmetric system containing an absorbing and emitting real gas-particle mixture. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31 :2261–2272, 1988.



# Annexes



# Annexe A

## Sensibilités

Nous voudrions ici souligner une conséquence heureuse du choix d'intégration de l'équation de transfert radiatif par la méthode de Monte Carlo : la possibilité de calculer sans tirage supplémentaire les sensibilités des grandeurs obtenues aux paramètres physiques caractérisant le système [de Lataillade et al., 2002a]. Dans le cas où la densité de probabilité  $p(x)$  utilisée est indépendante de la variable de dérivation  $y$ , le résultat est immédiat :

$$I = \int_D f(x; y) p(x) dx \Rightarrow \frac{\partial I}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \int_D f(x; y) p(x) dx$$
$$\frac{\partial I}{\partial y} = \int_D \left( \frac{\partial f(x; y)}{\partial y} p(x) + \underbrace{f(x; y) \frac{\partial p(x)}{\partial y}}_0 \right) dx$$

On a alors simplement :

$$\frac{\partial I}{\partial y} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \omega_i}{\partial y}$$

où  $\omega_i = f(x_i, y)$ .

La dérivée de la somme des intégrants est la somme des dérivées des intégrants. Le cas n'est plus aussi simple si la fonction de densité de probabilité dépend aussi du paramètre de dérivation  $p(x) = p(x; y)$ . Dans ce cas il faut faire intervenir un terme correctif sous la forme suivante :

$$\frac{\partial I}{\partial y} = \int_D \left( \frac{\partial f(x; y)}{\partial y} p(x) + f(x; y) \frac{\partial p(x)}{\partial y} \right) dx = \int_D \left( \partial_y f(x; y) + f(x; y) \frac{\partial_y p(x; y)}{p(x; y)} \right) p(x; y) dx$$
$$\frac{\partial I}{\partial y} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \omega_i}{\partial y} + \omega_i \frac{\partial_y p(x_i; y)}{p(x_i; y)} \right)$$

Dans le type de configuration que nous traitons, et dans la mesure où nous ne considérons pas de milieu diffusant dans le cadre de ce travail, nous nous intéressons principalement aux

sensibilités aux paramètres physiques d'entrée : la température des mailles, et les concentrations d'espèces rayonnantes.

## Sensibilité à la température

En première approximation, nous considérons que toute la dépendance en température des termes d'échanges nets vient de celle de la luminance noire. Cela signifie en particulier que nous négligeons les effets des variations de température sur les paramètres  $\bar{\kappa}$  et  $\phi$  du modèle de bandes étroites. Lors de chaque échange, le calcul de la sensibilité à la température ne coûte alors pas cher en terme de temps de calcul. En effet, les termes d'échange (équ. 4.24) comportent tous une partie énergétique. Celle-ci est seulement la différence de luminance noire  $\Delta L$  entre les points d'échange. Calculer la sensibilité à la température revient à remplacer  $\Delta L$  par  $\partial_T \Delta L$ .

## Annexe B

### Réflexions aux parois

La prise en compte des réflexions aux parois dans le cas d'un suivi de rayon par la méthode de Monte Carlo se fait simplement en prenant le symétrique du rayon arrivant dans le cas d'une surface spéculaire, et en retirant une direction sinon [Dutre, 1996]. Il est alors nécessaire d'introduire un critère d'arrêt du suivi des rayons. On commence fixer une précision  $E(W/m^3)$  sur le résultat pour l'ensemble des mailles. Puis nous calculons la précision sur l'échange dans chaque maille  $i$  :

$$\varepsilon_i = E.V_i$$

Si on isole la partie énergétique, on peut écrire l'échange entre les mailles  $i$  et  $j$  comme :

$$\varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} = \xi_{ij} \cdot [L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i)]$$

Comme  $\varphi_{V_i \leftrightarrow V_j}$  est le résultat de  $N$  tirages, un critère d'arrêt est :

$$\xi_{ij} \cdot |L_{\eta,b}(\vec{r}_j) - L_{\eta,b}(\vec{r}_i)| < \frac{\varepsilon_i}{N}$$

Ceci n'est vrai qu'en considérant l'échange entre les mailles  $i$  et  $j$ . Alors que l'objectif est d'obtenir un critère pour les rayons de toutes les mailles, quels que soient les échanges calculés. On considère donc les conditions les plus strictes :

$$\xi_{ij} < \frac{\varepsilon_{\min}}{N \cdot \Delta L_{\max}}$$

Où  $\Delta L_{\max}$  est la différence maximum de luminance noire dans le système, et  $\varepsilon_{\min}$  est le plus petit des  $\varepsilon_i$ , soit  $\varepsilon_{\min} = E.V_{\min}$  avec  $V_{\min}$  qui est le plus petit volume entre toutes les mailles.





# Annexe C

## Description d'un four de type industriel

```
#VRML V2.0 utf8
# Description d'un four de type industriel

PMShape {
  profile PMProfile {
    points [ 1. 1. 1. ]
    values [ 1500.0 ]
    name "temperature"
  }
}
PMShape {
  profile PMProfile {
    points [ 1. 1. 1.
    ]
    values [ 0.1
    ]
    name "fmh2o"
  }
}

Viewpoint {
#   position 11 -8 -12.5
  position 5 -8 -12.5
  orientation 0.988323 0.0642171 0.138182 2.38433
  fieldOfView 0.785398
}
```

```

#TOUR
#Face du bas
DEF F0_T1100_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [0.0 0.0 0.0, 16.0 0.0 0.0, 16.0 2.0 0.0, 0.0 2.0 0.0]
    }
    coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#Face arriere bas
DEF F1_T1400_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [0.0 0.0 0.0, 0.0 0.0 1.2, 0.0 2.0 1.2, 0.0 2.0 0.0]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#Face arriere haut
DEF F29_T1900_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [ 0.0 0.0 1.2, 0.0 0.0 1.8, 0.0 2.0 1.8, 0.0 2.0 1.2 ]
    }
  }
}

```

```

    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 0 0
    }
  }
}

```

```

#1ere face du haut
DEF F2_T1900_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [0.0 0.0 1.80, 2.0 0.0 1.80, 2.0 2.0 1.80, 0.0 2.0 1.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#1ere face descendante
DEF F3_T1500_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [2.0 0.0 1.80, 4.0 0.0 0.80, 4.0 2.0 0.80, 2.0 2.0 1.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
}

```

```

    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

#Partie de liaison, face du haut

```

DEF F4_T1300_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [4.0 0.0 0.80, 6.25 0.0 0.80, 6.25 2.0 0.80, 4.0 2.0 0.80]
        }
        coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

#Face arriere deuxieme partie/bas

```

DEF F5_T1300_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [6.25 0.0 0.80, 6.25 0.0 1.20, 6.25 2.0 1.20, 6.25 2.0 0.80]
        }
        coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

```

    }
}

```

```

#Face arriere deuxieme partie/haut

```

```

DEF F30_T1900_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [6.25 0.0 1.20, 6.25 0.0 1.80, 6.25 2.0 1.80, 6.25 2.0 1.20]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 0 0
    }
  }
}

```

```

#deuxieme partie face du haut

```

```

DEF F6_T1900_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [6.25 0.0 1.80, 9.25 0.0 1.80, 9.25 2.0 1.80, 6.25 2.0 1.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#deuxieme face descendante

```

```

DEF F7_T1600_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {

```

```

    coord Coordinate {
      point [9.25 0.0 1.80, 11.25 0.0 0.80, 11.25 2.0 0.80, 9.25 2.0 1.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

#deuxieme partie de liaison
DEF F8_T1500_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [11.25 0.0 0.80, 13.75 0.0 0.80, 13.75 2.0 0.80, 11.25 2.0 0.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#Face montante cheminee
DEF F9_T1300_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [13.75 0.0 0.80, 15 0.0 2.80, 15 2.0 2.80, 13.75 2.0 0.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
}

```

```

    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

#Face arriere cheminee
DEF F10_T1300_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [15 0.0 2.80, 15 0.0 5.0, 15 2.0 5.0, 15 2.0 2.80]
        }
        coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

```

#Face du haut cheminee
DEF F11_T1300_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [15 0.0 5.0, 16 0.0 5.0, 16 2.0 5.0, 15 2.0 5.0]
        }
        coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

```

    }
  }
}

```

```
#Face avant cheminee
```

```

DEF F12_T1300_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [16 0.0 5.0, 16 0.0 0.0, 16 2.0 0.0, 16 2.0 5.0]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```
#FACE ARRIERE
```

```
#Face opposee 1ere partie
```

```

DEF F13_T1400_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [0.0 2.0 0.0, 2.0 2.0 0.0, 2.0 2.0 1.8, 0.0 2.0 1.8]
    }
    coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```
#Face opposee descendante 1ere partie
```

```
DEF F14_T1400_E0.5 Shape {
```



```
geometry IndexedFaceSet {
  coord Coordinate {
    point [2.0 2.0 0.0, 4.0 2.0 0.0, 4.0 2.0 0.8, 2.0 2.0 1.8]
  }
  coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
  ccw TRUE
  solid FALSE
}
appearance Appearance
{
  material Material
  {
    diffuseColor 1 1 1
  }
}
}

#Face opposee 1ere liaison
DEF F15_T1300_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [4.0 2.0 0.0, 6.25 2.0 0.0, 6.25 2.0 0.8, 4.0 2.0 0.8]
    }
    coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

#Face opposee 2eme partie
DEF F16_T1400_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [6.25 2.0 0.0, 9.25 2.0 0.0, 9.25 2.0 1.80, 6.25 2.0 1.80]
    }
    coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
}
```

```

    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

#Face descendante 2eme partie
DEF F17_T1500_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [9.25 2.0 0.0, 11.25 2.0 0.0, 11.25 2.0 0.80, 9.25 2.0 1.80]
        }
        coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

#Face opposee 2eme liaison
DEF F18_T1500_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [11.25 2.0 0.0, 13.75 2.0 0.0, 13.75 2.0 0.80, 11.25 2.0 0.80]
        }
        coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

```

    }
}

```

```

#Face opposee montante cheminee
DEF F19_T1400_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [13.75 2.0 0.0, 15.0 2.0 0.0, 15.0 2.0 2.80, 13.75 2.0 0.80]
    }
    coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#Face opposee cheminee
DEF F20_T1300_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [15.0 2.0 0.0, 16.0 2.0 0.0, 16.0 2.0 5.0, 15.0 2.0 5.0]
    }
    coordIndex [0 1 2 3 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

```

```

#FACES AVANT
#Face avant 1ere partie
DEF F21_T1400_E0.5 Shape {

```

```

geometry IndexedFaceSet {
  coord Coordinate {
    point [0.0 0.0 0.0, 2.0 0.0 0.0, 2.0 0.0 1.8, 0.0 0.0 1.8]
  }
  coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
  ccw TRUE
  solid FALSE
}
appearance Appearance
{
  material Material
  {
    diffuseColor 1 1 1
  }
}
}

#Face avant descendante 1ere partie
DEF F22_T1400_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [2.0 0.0 0.0, 4.0 0.0 0.0, 4.0 0.0 0.8, 2.0 0.0 1.8]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

#Face avant 1ere liaison
DEF F23_T1300_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [4.0 0.0 0.0, 6.25 0.0 0.0, 6.25 0.0 0.8, 4.0 0.0 0.8]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
  }
}

```

```

        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

#Face avant 2eme partie
DEF F24_T1400_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [6.25 0.0 0.0, 9.25 0.0 0.0, 9.25 0.0 1.80, 6.25 0.0 1.80]
        }
        coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

#Face avant descendante 2eme partie
DEF F25_T1500_E0.5 Shape {
    geometry IndexedFaceSet {
        coord Coordinate {
            point [9.25 0.0 0.0, 11.25 0.0 0.0, 11.25 0.0 0.80, 9.25 0.0 1.80]
        }
        coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
        ccw TRUE
        solid FALSE
    }
    appearance Appearance
    {
        material Material
        {
            diffuseColor 1 1 1
        }
    }
}

```

```

    }
  }
}

#Face avant 2eme liaison
DEF F26_T1500_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [11.25 0.0 0.0, 13.75 0.0 0.0, 13.75 0.0 0.80, 11.25 0.0 0.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

#Face avant montante cheminee
DEF F27_T1400_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {
    coord Coordinate {
      point [13.75 0.0 0.0, 15.0 0.0 0.0, 15.0 0.0 2.80, 13.75 0.0 0.80]
    }
    coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
    ccw TRUE
    solid FALSE
  }
  appearance Appearance
  {
    material Material
    {
      diffuseColor 1 1 1
    }
  }
}

#Face avant cheminee
DEF F28_T1300_E0.5 Shape {
  geometry IndexedFaceSet {

```

```
coord Coordinate {
  point [15.0 0.0 0.0, 16.0 0.0 0.0, 16.0 0.0 5.0, 15.0 0.0 5.0]
}
coordIndex [0 3 2 1 -1 ]
ccw TRUE
solid FALSE
}
appearance Appearance
{
  material Material
  {
    diffuseColor 1 1 1
  }
}
}
```