
Validation de l'algorithme à collisions nulles pour différentes épaisseurs optiques

Dans l'optique de valider l'algorithme présenté à la Fig. 4.7, ce dernier a été comparé à un algorithme standard de Monte-Carlo bien maîtrisé, formulé en épaisseur optique et dans lequel l'inversion des épaisseurs optiques est réalisée en ajustant de façon très précise le champ du coefficient d'extinction, le long d'une ligne de visée, par une décomposition en splines cubiques (inversible analytiquement). Pour cette validation, le bilan radiatif monochromatique a été calculé par les deux algorithmes en deux points du milieu participant d'intérêt : le centre du cube $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et le point où les épaisseurs optiques sont maximales $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ (voir Fig. 4.4)². Le champ de \hat{k}_η est défini de façon uniforme comme égal à $k_{a,\eta}^{\max} + k_{d,\eta}^{\max}$ ($\rho = 1$). Ainsi, excepté en $\mathbf{x} = [-D, 0, 0]$ où il est nul, le champ du coefficient de collision nulle est toujours strictement positif. En première approximation, on considère également les parois comme noires ($\varepsilon = 1$) de température $T_w = 0K$ et le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase d'Henyeey-Greenstein égal à 0 (fonction de phase isotrope).

Les tables 4.1 et 4.2 rassemblent les résultats obtenus respectivement pour $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par les deux algorithmes et pour différentes épaisseurs optiques maximales d'absorption $k_{a,\eta}^{\max} D$ et de diffusion $k_{d,\eta}^{\max} D$. Pour chacun de ces deux algorithmes, l'estimation du bilan radiatif ainsi que son écart-type adimensionnalisés sont donnés. Ceux-ci sont respectivement définis par $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)/[4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0)]$ et $\sigma/[4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0)]$. De plus, pour l'algorithme à collisions nulles, les temps de calcul pour 10^6 réalisations indépendantes (noté t) et pour obtenir un écart-type relatif de 1% (noté $t_{1\%}$) sont également fournis³. La simulation a été effectuée avec un processeur "Intel Core i5 - 2.4GHz" sans parallélisation.

Les estimations du bilan radiatif par ces deux algorithmes concordent parfaitement. Les erreurs relatives indiquent également un bon niveau de convergence de l'algorithme à collisions nulles quelles que soient les épaisseurs optiques considérées (l'erreur relative $e = \sigma/S_{r,\eta}$ obtenue après 10^6 réalisations est inférieure à 0.2% dans tous les cas). Enfin, les temps de calcul relevés pour l'algorithme à collisions nulles sont du même ordre de grandeurs que ceux que l'on rencontrerait avec un algorithme standard de Monte-Carlo dans lequel les propriétés du milieu seraient uniformes. L'ajout de collisions nulles, sans aucun effet sur la précision du calcul, semble donc n'avoir eu qu'un effet modéré sur ces temps de calcul.

4.3.2.3 Prise en compte de coefficients de collision nulle négatifs

Jusqu'à présent, l'algorithme proposé ne permettait que de définir un coefficient \hat{k}_η supérieur en tous points au coefficient d'extinction réel k_η . Il est possible, comme

2. Le choix d'estimer le bilan radiatif en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ est motivé par le fait que lorsque l'on étendra l'algorithme à collisions nulles aux valeurs négatives de $k_{n,\eta}$, ce sera en ce point que le $k_{n,\eta}$ sera le plus faible.

3. Du fait de la lourdeur de l'approche numérique d'inversion utilisée dans la méthode de validation, les temps de calcul relatifs à cet algorithme (n'apportant pas de réel élément de comparaison) ne sont pas affichés.

Epaiss. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations)				Algo. de validation	
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ	t	$t_{1\%}$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ
		$\frac{S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$			$\frac{S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$
0.1	0.1	-0.483813	8.52E-05	2.43	7.54E-04	-0.483717	2.34E-05
0.1	1	-0.482031	8.97E-05	7.92	2.74E-03	-0.481921	2.91E-05
0.1	3	-0.477997	9.90E-05	24.25	1.04E-02	-0.477883	4.04E-05
0.1	10	-0.463027	1.27E-04	122.69	9.23E-02	-0.463068	7.69E-05
1	0.1	-0.366086	2.09E-04	2.94	9.58E-03	-0.365971	2.18E-04
1	1	-0.356169	2.13E-04	7.43	2.66E-02	-0.356353	2.51E-04
1	3	-0.335850	2.20E-04	19.2	8.24E-02	-0.335928	3.16E-04
1	10	-0.277205	2.28E-04	76.39	5.17E-01	-0.27683	4.84E-04
3	0.1	-0.218989	2.21E-04	3.48	3.54E-02	-0.218942	5.62E-04
3	1	-0.209261	2.18E-04	6.4	6.95E-02	-0.209529	6.01E-04
3	3	-0.190256	2.10E-04	13.63	1.66E-01	-0.190141	6.84E-04
3	10	-0.144073	1.84E-04	41.38	6.75E-01	-0.143501	8.85E-04
10	0.1	-0.071271	1.19E-04	3.49	9.73E-02	-0.07137	1.28E-03
10	1	-0.068662	1.15E-04	4.66	1.31E-01	-0.068854	1.31E-03
10	3	-0.063501	1.07E-04	7.29	2.07E-01	-0.063369	1.36E-03
10	10	-0.050674	8.49E-05	16.23	4.56E-01	-0.050674	1.47E-03

TABLE 4.1 – Estimations, écarts-types et temps de calcul obtenus par l’algorithme à collisions nulles pour 10^6 réalisations en $\mathbf{x} = [0, 0, 0]$ pour plusieurs valeurs d’épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion. Les résultats sont comparés à ceux obtenus à partir d’un algorithme de Monte-Carlo faisant office de méthode de référence.

Epaiss. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations)				Algo. de validation	
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ	t	$t_{1\%}$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$	σ
		$\frac{S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$			$\frac{S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$
0.1	0.1	-0.977296	1.27E-04	2.24	3.78E-04	-0.977336	2.64E-05
0.1	1	-0.97683	1.29E-04	6.18	1.08E-03	-0.976679	2.86E-05
0.1	3	-0.975682	1.33E-04	15.3	2.84E-03	-0.975767	3.30E-05
0.1	10	-0.974828	1.37E-04	44.9	8.87E-03	-0.974733	4.47E-05
1	0.1	-0.822495	3.24E-04	2.38	3.69E-03	-0.822111	2.40E-04
1	1	-0.822446	3.26E-04	5.13	8.06E-03	-0.821846	2.47E-04
1	3	-0.823933	3.29E-04	10.75	1.71E-02	-0.823994	2.60E-04
1	10	-0.83941	3.27E-04	26.32	3.99E-02	-0.839533	2.73E-04
3	0.1	-0.658358	4.07E-04	2.22	8.48E-03	-0.657242	5.54E-04
3	1	-0.66479	4.09E-04	3.73	1.41E-02	-0.664704	5.45E-04
3	3	-0.67959	4.12E-04	6.67	2.45E-02	-0.679703	5.27E-04
3	10	-0.72422	4.10E-04	14.49	4.64E-02	-0.722886	4.73E-04
10	0.1	-0.544282	4.62E-04	1.98	1.43E-02	-0.5438	8.46E-04
10	1	-0.551703	4.63E-04	2.47	1.74E-02	-0.551153	8.29E-04
10	3	-0.567704	4.65E-04	3.54	2.38E-02	-0.567366	7.90E-04
10	10	-0.61077	4.65E-04	6.76	3.92E-02	-0.609865	7.00E-04

TABLE 4.2 – Estimations, écarts-types et temps de calcul obtenus par l’algorithme à collisions nulles pour 10^6 réalisations en $\mathbf{x} = [-D, 0, 0]$ pour plusieurs valeurs d’épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion. Les résultats sont comparés à ceux obtenus à partir d’un algorithme de Monte-Carlo faisant office de méthode de référence.

proposé à la [Sec. 4.2.4](#) de définir de nouvelles probabilités pour s'affranchir de cette contrainte. Dans la continuité de la probabilité d'émission/absorption proposée à la [Sec. 4.2.4](#) pour un cas purement absorbant/émettant, nous proposons ici les probabilités suivantes pour tenir compte de la diffusion :

- $\tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}) = \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x})}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}$ comme probabilité d'émission/absorption,
- $\tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}) = \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x})}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}$ comme probabilité de diffusion,
- $\tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}) = \frac{|k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}{k_{a,\eta}(\mathbf{x}) + k_{d,\eta}(\mathbf{x}) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x})|}$ comme probabilité de collision nulle.

Ainsi quel que soit le champ de \hat{k} (majorant ou non), ces probabilités sont bien comprises entre 0 et 1 et leur somme vaut 1.

Ce changement de probabilités modifie sensiblement l'expression récursive de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ présente dans le bilan radiatif $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$. Leur introduction dans l'[Eq. 4.35](#) conduit alors à :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \\ + \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.36)$$

L'expression du bilan radiatif $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ sous forme d'espérance est alors substantiellement modifiée. Il vient :

$$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0) = \mathbb{E} \left[\begin{array}{l} k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) \sum_{j=1}^\infty \left[A_{e,j} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j}) + A_{a,j} \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j) \tilde{\mathcal{P}}_a(\mathbf{x}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_j) \right] \\ \times \prod_{q=1}^{j-1} (1 - A_{e,q} - A_{a,q}) \left(A_{r,q} + A_{d,q} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_q)} + A_{n,q} \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_q)} \right) \\ - 4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_0) \end{array} \right] \quad (4.37)$$

où les variables aléatoires :

- $A_{e,j}$ vaut 1 si une émission a lieu en $\mathbf{x}_{w,j}$, 0 sinon.
- $A_{a,j}$ vaut 1 si une absorption a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.
- $A_{r,j}$ vaut 1 si une réflexion a lieu en $\mathbf{x}_{w,j}$, 0 sinon.
- $A_{d,j}$ vaut 1 si une diffusion a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.

- $A_{n,j}$ vaut 1 si une collision nulle a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.

L'algorithme de Monte-Carlo correspondant est donné à la Fig. 4.8

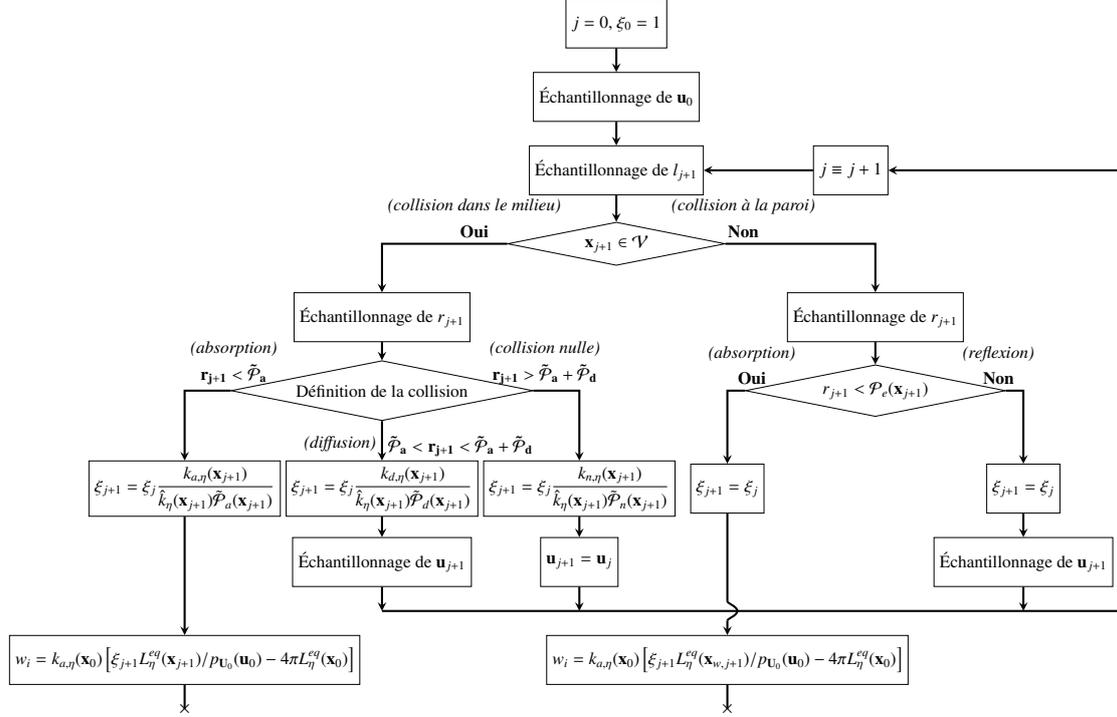


FIGURE 4.8 – Extension de l'algorithme de la Fig. 4.7, permettant d'estimer $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$, aux coefficients négatifs de collision nulle. Trois nouvelles probabilités d'absorption \tilde{P}_a , de diffusion \tilde{P}_d et de collisions nulles \tilde{P}_n ont été introduites. Les poids de Monte-Carlo w_i résultant de ce changement sont modifiés en conséquence.

4.3.2.4 Comportement numérique en fonction des valeurs du coefficient de collision nulle

Il devient ainsi possible de réaliser en toute généralité une étude de l'effet du \hat{k}_η sur le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo. Pour mener à bien cette analyse, plusieurs calculs du bilan radiatif monochromatique ont été effectués, à partir de l'algorithme de la Fig. 4.8, pour plusieurs valeurs de $\rho = \hat{k}_\eta / k_\eta^{\max}$ allant de $\rho = 0.5$ (où \hat{k}_η ne majore que localement le coefficient d'extinction réel k_η) à $\rho = 5$ (où \hat{k}_η majore en tout point et très largement k_η). Les Fig. 4.9, Fig. 4.10 et Fig. 4.11 décrivent respectivement les évolutions de l'erreur relative, du temps de calcul pour 10^6 réalisations et du temps de calcul pour obtenir une erreur relative de 1% en fonction de ρ , pour différentes épaisseurs optiques et deux points d'intérêts : $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$.

Pour $\rho > 1$, l'écart-type de l'estimation du bilan radiatif monochromatique est indépendant du coefficient de collision nulle (voir Fig. 4.9). En effet, les algorithmes à collisions nulles ne constituent qu'un artefact statistique et numérique permettant

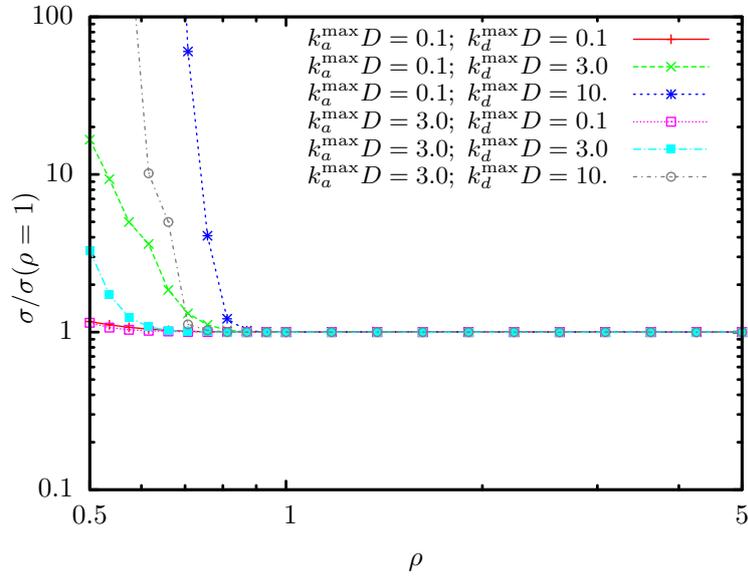
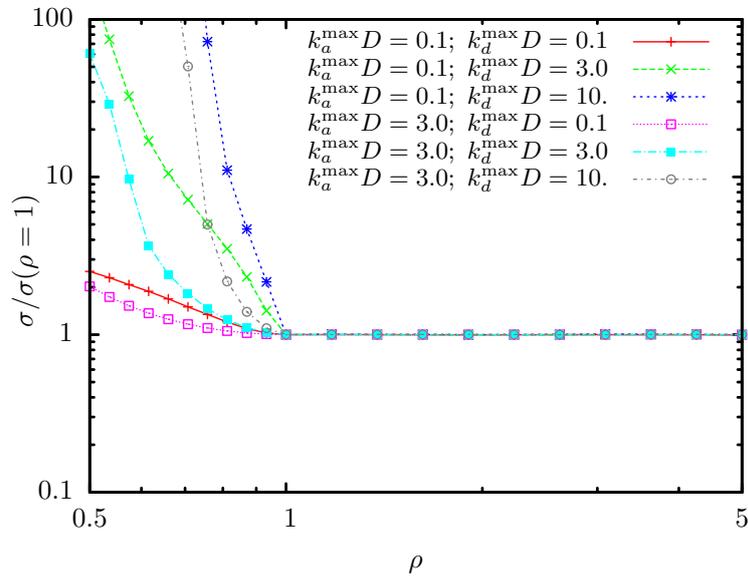
(A) $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ (B) $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$

FIGURE 4.9 – Écart-type adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$ pour le calcul de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.8.

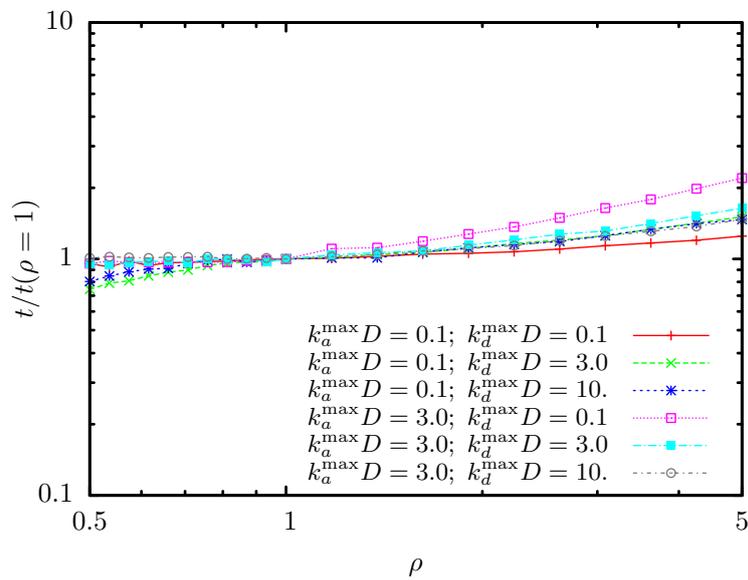
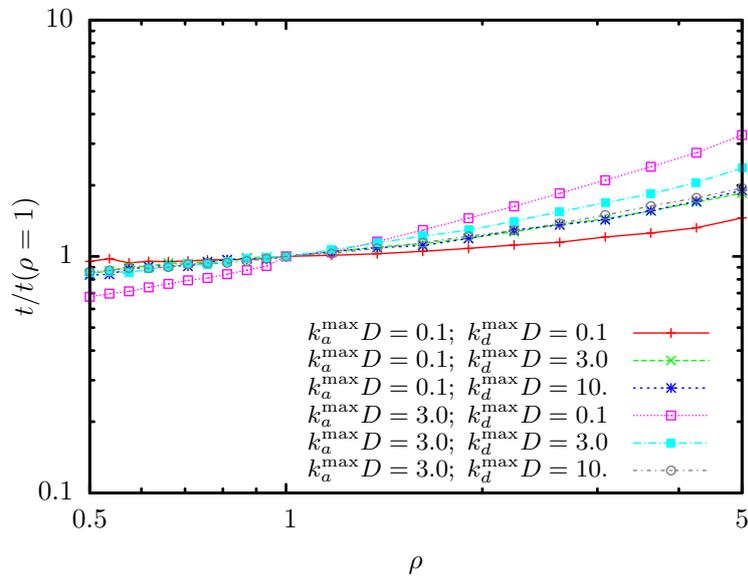


FIGURE 4.10 – Temps de calcul adimensionnalisés en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$ pour le calcul de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.8.

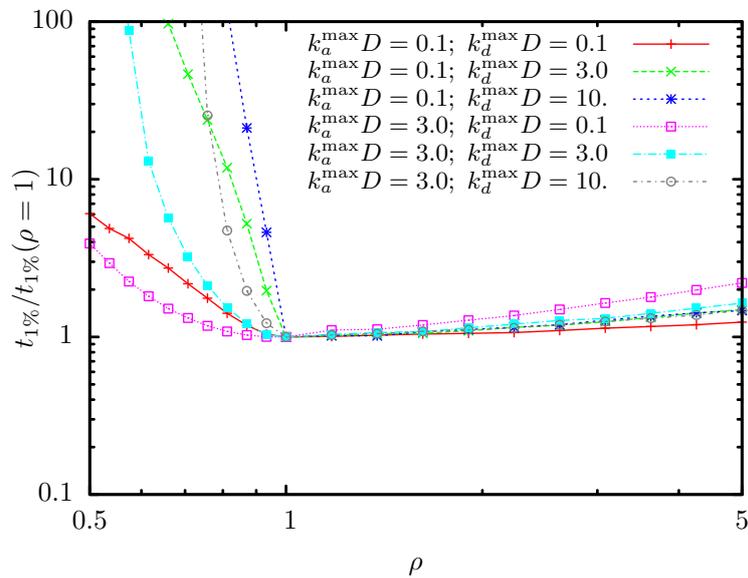
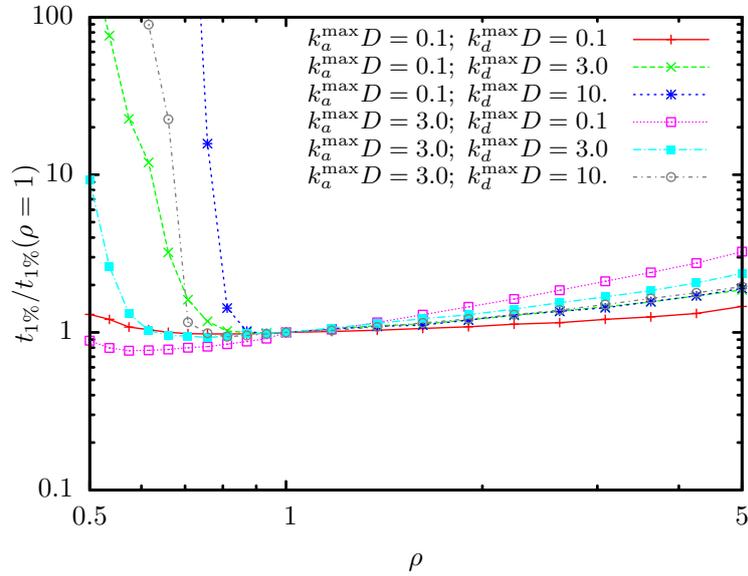


FIGURE 4.11 – Temps de calcul pour une erreur relative de 1% adimensionnalisé en fonction de ρ , $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$ pour le calcul de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.8.

un échantillonnage plus aisé des libres parcours d'extinction. L'ajout de collisions nulles a seulement une incidence sur le temps de calcul : plus il y aura de collisions nulles (sans effet sur la convergence du calcul) plus le temps de calcul sera long (voir Fig. 4.10 et Fig. 4.11).

Au contraire, plus la valeur de ρ est petite devant 1, plus l'écart-type associé à l'estimation du bilan radiatif est important et croît de façon rapide, voir Fig. 4.8. Ce comportement était en effet attendu. L'introduction de nouvelles probabilités permettant de prendre en compte des occurrences négatives de $k_{n,\eta}$ engendre dans l'expression des poids de Monte-Carlo l'apparition d'un produit correctif. La valeur de ce dernier croît et est susceptible de changer de signe à chaque fois qu'une collision a lieu dans une région où les coefficients de collision nulle sont négatifs (cf. Sec. 4.2.4). Si un grand nombre d'événements de diffusion ou de collisions nulles se produisent le long du chemin optique dans une région où $k_n < 0$, les poids de Monte-Carlo peuvent alors avoir des valeurs absolues très importantes et d'une très grande variance, expliquant ainsi l'accroissement conséquent de l'écart-type associé à l'estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$. Cet effet est naturellement plus prononcé lorsque le point sonde \mathbf{x}_0 appartient à la zone où $k_{n,\eta} < 0$ (voir Fig. 4.9b) que lorsque les chemins optiques partent d'une zone où $k_{n,\eta} > 0$ (voir Fig. 4.9a).

Toutefois, cette augmentation brutale de l'écart-type doit être relativisée : la proposition de la Sec. 4.2.4 permettant d'autoriser des occurrences de $k_{n,\eta} > 0$ est faite pour éviter un biais des résultats de simulations dans le cas où le champ de \hat{k}_η choisi ne majorerait pas parfaitement le champ du coefficient d'absorption réel (elle n'entraîne aucune modification si $\hat{k}_\eta(\mathbf{x}) > k_\eta(\mathbf{x})$). Ainsi, on remarque que si le choix du champ de \hat{k}_η est suffisamment bien pensé ($\rho > 0.9$), l'augmentation d'écart-type due aux coefficients négatifs de collisions nulles reste mesurée (elle est multipliée par 4 dans le cas le plus défavorable).

Enfin, ces trois jeux de graphiques nous permettent de constater que les temps de calcul décroissent avec la valeur de ρ pour un nombre donné N_{mc} de réalisations indépendantes, (voir Fig. 4.10). Cela vient simplement du fait que plus faible est la valeur de ρ , moins il y a d'événements de diffusion et de collisions nulles. En effet, plus ρ est faible, plus la valeur de \hat{k} l'est aussi, les libres parcours échantillonnés selon $\hat{p}_L(l)$ sont alors beaucoup plus longs, favorisant une absorption rapide aux parois. Toutefois, excepté pour le cas particulier d'un milieu très mince, cette décroissance des temps de calcul ne compense pas l'augmentation de l'erreur relative due aux coefficients négatifs de collision nulle (voir Fig. 4.11). Pour une erreur relative désirée, le temps de calcul est donc à la fois conditionné par l'effet de ρ sur la variance (voir Fig. 4.11 pour $\rho < 1$) et sur la quantité de collisions nulles qui augmente mécaniquement, mais dans une moindre mesure, ce temps de calcul (voir Fig. 4.11 pour $\rho > 1$). À la vue de l'évolution des temps de calcul nécessaires à l'obtention d'une erreur relative d'1%, il semble préférable, en cas de doute, de définir un champ de \hat{k} majorant largement celui du coefficient d'extinction que de risquer une explosion de variance causée par un trop grand nombre de collisions nulles caractérisées par des coefficients négatifs.

4.3.2.5 Influence de l'émissivité et du paramètre d'asymétrie de la fonction de phase

Plusieurs simulations ont également été réalisées pour des paramètres d'asymétrie de la fonction de phase différents de 0 et des émissivités de paroi inférieures à 1.

Le paramètre d'asymétrie n'a que très peu d'effet sur le comportement numérique de l'algorithme à collisions nulles. Inévitablement, l'estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ est sensible à ces changements (puisque le modèle physique est modifié), mais les effets sur les erreurs relatives et les temps de calcul semblent négligeables.

La réflexion multiple aux parois a, quant à elle, des conséquences sur le comportement de l'algorithme. Elle agit de la même manière que la diffusion : elle a une tendance à accroître la longueur des chemins parcourus par les photons avant d'être absorbés. Ainsi, un plus grand nombre de collisions ont lieu, augmentant alors les temps de calcul. Dans les zones où les coefficients de collision nulle sont négatifs, la réflexion multiple a tendance, au même titre que la diffusion (*cf.* Fig. 4.11) mais dans une moindre mesure, à augmenter davantage l'écart-type estimé.

4.3.3 Traitement déterministe des événements d'émission - approche par "Energy-partitioning"

Jusqu'à présent, à chaque fois qu'un point de collision était identifié, un test statistique, de type roulette russe, avait lieu pour savoir s'il s'agissait d'une émission (par le milieu ou par la paroi), d'une réflexion, d'une diffusion ou d'une collision nulle. S'il s'agissait d'une émission, la réalisation serait stoppée et un poids w_i serait calculé. Il pourrait cependant être intéressant de traiter de façon déterministe ces événements d'émission. Ainsi, après une émission/absorption les photons continueraient leur chemin, mais une information locale relative à l'émission serait prise compte. Les poids de Monte-Carlo w_i seraient alors définis comme une somme de contributions d'émission rencontrées le long d'un chemin optique. Une telle approche, présentée à la Sec. 3.4.2, est connue sous le nom d'*energy-partitioning* ou de *pathlength-method*. L'application de ce traitement déterministe à l'estimation du bilan radiatif monochromatique $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ et ses conséquences sur le comportement numérique des algorithmes à collisions sont discutés dans cette section.

4.3.3.1 Présentation de l'algorithme de type "energy partitioning"

Traiter de façon déterministe les émissions équivaut à reformuler l'Eq. 4.36 en :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_{j+1})} \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \\ + \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1}) \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_{j+1})}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_{j+1}) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_{j+1})} L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.38)$$

où les émissivités $\varepsilon(\mathbf{x}_{w,1})$ et l'albédo d'absorption $k_{a,\eta}(\mathbf{x}_1)/\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_1)$ sont désormais traités de façon déterministe. Les probabilités $\tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_j)$ et $\tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_j)$ ont volontairement été conservées, car d'un point de vue algorithmique il est très difficile de suivre deux chemins optiques simultanément (problèmes de branchage : à chaque collision deux nouveaux chemins optiques seraient créés, chacun menant à deux autres chemins, *etc.*). Il demeure plus simple de réaliser un test de Bernoulli pour déterminer si la collision mène à une diffusion du photon (selon la fonction de phase $\phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1})$) ou à une collision nulle (diffusion vers l'avant). Cependant, les expressions de ces deux probabilités doivent être modifiées pour que leur somme soit bien normée. Dans l'optique d'autoriser des occurrences de coefficients de collision nulle négatifs, nous proposons ici les expressions

$$\tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_j) = \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_j)}{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_j) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|} \quad (4.39)$$

et

$$\tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_j) = \frac{|k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|}{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_j) + |k_{n,\eta}(\mathbf{x}_j)|} \quad (4.40)$$

Le bilan radiatif $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ correspond alors à l'espérance de la variable aléatoire W définie comme :

$$W = \sum_{j=1}^{\infty} \left[\mathcal{H}(\mathbf{X}_j \notin \mathcal{V}) \varepsilon(\mathbf{X}_{w,j}) L_\eta^{eq}(\mathbf{X}_{w,j}) + \mathcal{H}(\mathbf{X}_j \in \mathcal{V}) \frac{k_{a,\eta}(\mathbf{X}_j)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{X}_j)} L_\eta^{eq}(\mathbf{X}_j) \right] \times \prod_{q=1}^{j-1} \left(A_{r,q} (1 - \varepsilon(\mathbf{X}_{w,q})) + A_{d,q} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{X}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{X}_q) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{X}_q)} + A_{n,q} \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{X}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{X}_q) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{X}_q)} \right) \quad (4.41)$$

où la variable aléatoire $A_{r,j}$ vaut 1 si une réflexion a lieu en $\mathbf{x}_{w,j}$, 0 sinon ; où $A_{d,j}$ vaut 1 si une diffusion a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon et où $A_{n,j}$ vaut 1 si une collision nulle a lieu en \mathbf{x}_j , 0 sinon.

Toutefois, implémenter un algorithme de Monte-Carlo qui consiste à échantillonner W pose un sérieux problème dès lors que les parois ne sont pas noires : les chemins que parcourent les photons sont infinis. En effet, à chaque collision, une contribution d'émission est calculée, puis le chemin optique est poursuivi. En aucun cas, un événement n'est capable de stopper la progression de ce chemin. En des termes plus algorithmiques, on voit apparaître une boucle, sans condition d'arrêt.

Plutôt que de stopper arbitrairement ces chemins, on propose alors de définir un test dans l'algorithme qui, une fois validé, fera permuter cet algorithme (dans lequel les émissions sont traitées de façon déterministe) vers son homologue dans lequel le type de collision est déterminé par un test de Bernoulli (*cf.* [Sec. 4.3.2](#)). Ainsi, ces chemins infinis pourront être stoppés sans aucun biais (ce qui n'aurait pas été le cas si l'on avait tronqué arbitrairement ces chemins). Le critère faisant passer d'une variante algorithmique à l'autre est totalement libre. Nous proposons ici de considérer la grandeur

$$\xi_j = \prod_{q=1}^{j-1} \left(A_{r,q}(1 - \varepsilon(\mathbf{x}_{w,q})) + A_{d,q} \frac{k_{d,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_d(\mathbf{x}_q)} + A_{n,q} \frac{k_{n,\eta}(\mathbf{x}_q)}{\hat{k}_\eta(\mathbf{x}_q) \tilde{\mathcal{P}}_n(\mathbf{x}_q)} \right) \quad (4.42)$$

présente dans l'expression de W . Cette grandeur, que nous qualifierons de *critère d'extinction*, caractérise la fraction de photons transmise après j collisions. Au début de la réalisation, quand aucune collision n'a encore eu lieu, elle est égale à 1, puis elle ne cesse de décroître au fur et à mesure que des collisions sont rencontrées, rendant ainsi les contributions à W de plus en plus faibles. Pour définir le test à partir duquel les émissions seront traitées de façon statistique, on définit également un seuil ζ compris entre 0 et 1. Tant que $\xi_j > \zeta$ les émissions sont traitées de façon déterministe, puis lorsque ξ_j passe en dessous du seuil ζ on passe à un traitement par tests de Bernoulli pour déterminer le type de collision, permettant ainsi de mettre un terme à la réalisation. Plus la valeur de ζ sera faible, plus la branche où les émissions sont prises en compte de façon déterministe sera privilégiée. Au contraire, en fixant $\zeta = 1$, l'algorithme correspond strictement à celui présenté à la [Sec. 4.3.2](#) : toutes les collisions seront traitées statistiquement par un test de Bernoulli. L'algorithme correspondant à cette approche est présenté en intégralité par la [Fig. 4.12](#).

4.3.3.2 Influence de ζ sur le comportement numérique de l'algorithme à collisions nulles

Aussi, il est intéressant d'étudier l'influence que joue ce seuil ζ sur le comportement de l'algorithme de Monte-Carlo. Des bilans radiatifs monochromatiques $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ aux points $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ ont alors été estimés par l'algorithme présenté à la [Fig. 4.12](#), pour différentes valeurs de ζ , de ρ et pour différentes épaisseurs optiques maximales $k_{a,\eta}^{\max} D$ et $k_{d,\eta}^{\max} D$. La valeur du champ d'extinction arbitraire \hat{k}_η est définie comme égale à k_η^{\max} ($\rho = 1$, les coefficients de collision nulle sont positifs en tout point).

Les [Tab. 4.3](#) et [4.4](#) rassemblent les résultats de simulations obtenus aux deux

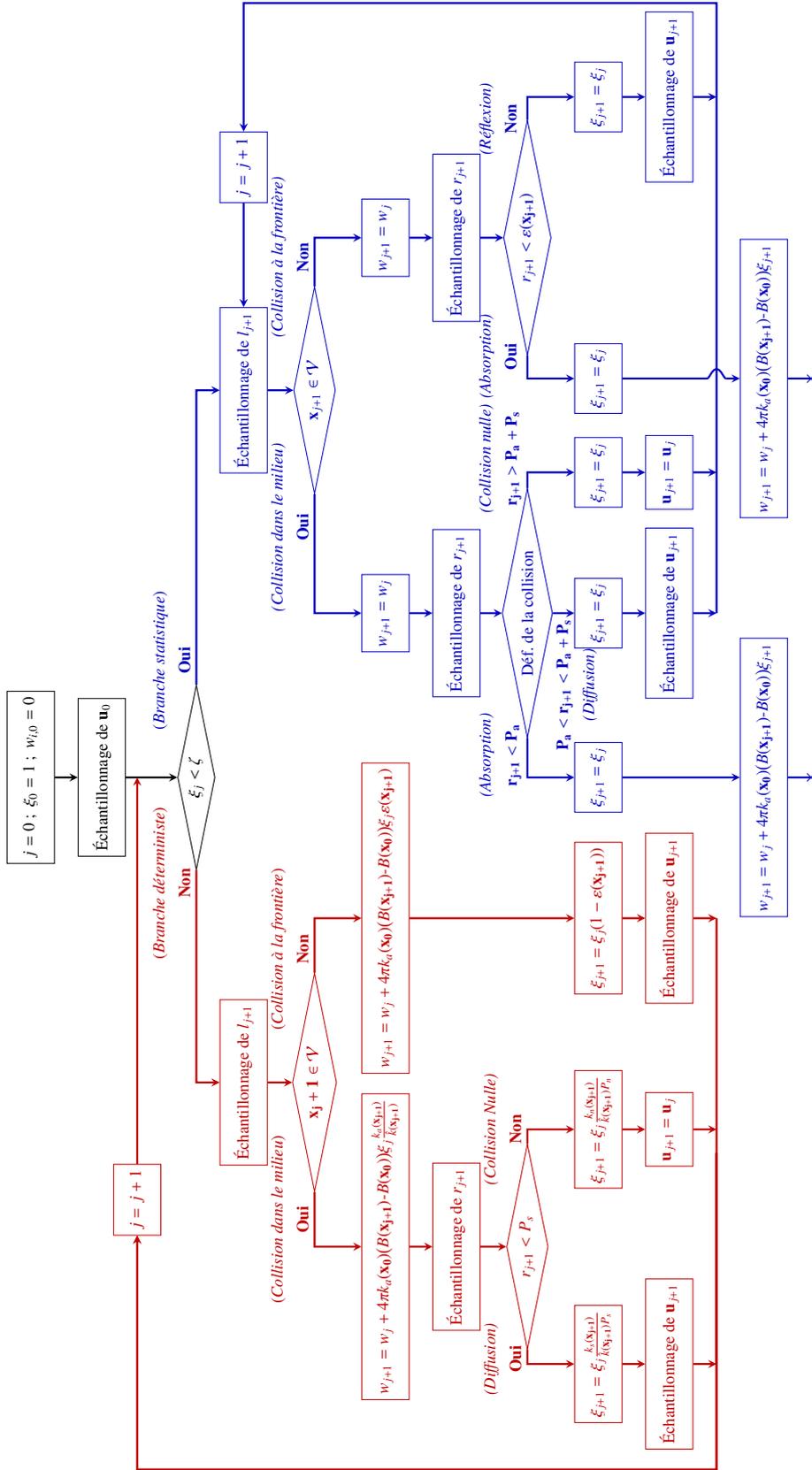


FIGURE 4.12 – Description de l’algorithme proposé. Tant que le critère d’extinction ξ_j est supérieur à ζ les émissions sont traitées de façon déterministe. Une fois ce seuil passé, l’algorithme permute vers l’algorithme présenté à la Fig. 4.8 dans lequel les émissions sont traitées de façon statistique.

points sondes $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ et $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ pour des parois noires et pour un seuil ζ fixé à 0.1 (le basculement de la branche déterministe à celle stochastique a lieu lorsque l'extinction le long du chemin optique dépasse 90%). Ces résultats peuvent être comparés à ceux des Tab. 4.1 et 4.2 obtenus avec l'algorithme présenté à la Fig. 4.8 dans lequel les collisions sont traitées uniquement par roulette russe (cet algorithme est strictement équivalent à celui de la Fig. 4.12 dans lequel le seuil ζ serait fixé à 1).

Épais. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations, $\zeta = 0.1$)				Comp.
$k_{a,\eta}^{\max} D$	$k_{d,\eta}^{\max} D$	$S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$		t	$t_{1\%}$	$\frac{t_{1\%}(\zeta=0.1)}{t_{1\%}(\zeta=1)}$
		$4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)$	σ			
0.1	0.1	-0.483586	0.000044	2.31	0.00019	0.253
0.1	1	-0.481950	0.000024	7.77	0.00019	0.072
0.1	3	-0.477917	0.000023	23.72	0.00054	0.055
0.1	10	-0.463036	0.000035	122.94	0.00707	0.081
1	0.1	-0.366263	0.000142	3.38	0.00510	0.552
1	1	-0.356208	0.000123	10.10	0.01200	0.475
1	3	-0.335460	0.000117	27.58	0.03373	0.422
1	10	-0.277008	0.000127	127.77	0.26892	0.541
3	0.1	-0.219155	0.000153	5.51	0.02701	0.785
3	1	-0.209308	0.000144	12.76	0.06017	0.903
3	3	-0.190219	0.000132	29.96	0.14535	0.927
3	10	-0.143645	0.000112	105.20	0.64103	0.993
10	0.1	-0.071424	0.000081	8.66	0.11055	1.185
10	1	-0.068768	0.000077	13.11	0.16317	1.310
10	3	-0.063507	0.000070	22.45	0.27110	1.393
10	10	-0.050786	0.000054	52.92	0.59544	1.366

TABLE 4.3 – Résultats et temps de calcul obtenus lors de l'estimation de $S_{r,\eta}$ en $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$ par l'algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.12. Le seuil de permutation algorithmique est fixé à $\zeta = 0.1$. La dernière colonne indique le rapport entre le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 0.1$ et le temps nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 1$.

On constate que les résultats obtenus avec ce nouvel algorithme où $\zeta = 0.1$ concordent parfaitement, aux intervalles de confiance près, avec ceux obtenus avec l'algorithme où les collisions sont traitées uniquement par roulette russe ($\zeta = 1$). La proposition faite dans cette section est ainsi validée. La dernière colonne de ces deux tables indique le rapport entre le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 0.1$ et le temps nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% pour $\zeta = 1$. Si ce rapport est inférieur à 1, le traitement déterministe des émissions est plus efficient qu'un traitement par roulette russe. Au contraire s'il est supérieur à 1, l'algorithme introduit à la Fig. 4.8 est le plus performant. On remarque alors que pour des épaisseurs optiques d'absorption minces, le traitement déterministe des émissions accélère sensiblement les temps de calcul (jusqu'à 12 fois plus rapides). Pour des épaisseurs optiques d'absorption importantes, il a tendance à augmenter ces mêmes temps de calcul (d'un facteur 3 dans le cas le plus défavorable). Il est possible d'interpréter cette différence de comportement algorithmique par le fait qu'en traitant de façon déterministe les collisions, de l'information relative

Epais. optiques		Algo. à collisions nulles (10^6 réalisations, $\zeta = 0.1$)				Comp.
$k_{a,\eta}^{\max D}$	$k_{d,\eta}^{\max D}$	$\frac{S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	$\frac{\sigma}{4\pi k_{a,\eta}(\mathbf{x}_0)L_{\eta}^{eq}(\mathbf{x}_0)}$	t	$t_{1\%}$	$\frac{t_{1\%}(\zeta=0.1)}{t_{1\%}(\zeta=1)}$
0.1	0.1	-0.977195	0.000081	2.24	0.00016	0.413
0.1	1	-0.976700	0.000041	6.19	0.00011	0.103
0.1	3	-0.975783	0.000035	15.17	0.00020	0.074
0.1	10	-0.974777	0.000042	46.19	0.00088	0.103
1	0.1	-0.821998	0.000285	3.31	0.00398	1.138
1	1	-0.821967	0.000237	8.34	0.00692	0.897
1	3	-0.823956	0.000215	17.71	0.01202	0.717
1	10	-0.839442	0.000220	46.75	0.03208	0.831
3	0.1	-0.657423	0.000388	4.23	0.01471	1.782
3	1	-0.664806	0.000365	9.43	0.02851	2.101
3	3	-0.679347	0.000345	16.61	0.04289	1.801
3	10	-0.723130	0.000327	34.46	0.07053	1.574
10	0.1	-0.544147	0.000450	3.72	0.02660	1.922
10	1	-0.551601	0.000452	7.88	0.05288	3.089
10	3	-0.568200	0.000438	10.89	0.06467	2.791
10	10	-0.611147	0.000411	19.32	0.08731	2.305

TABLE 4.4 – Résultats et temps de calcul obtenus lors de l’estimation de $S_{r,\eta}$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l’algorithme à collisions nulles de la Fig. 4.12. Le seuil de permutation algorithmique est fixé à $\zeta = 0.1$. La dernière colonne indique le rapport entre le temps de calcul nécessaire à l’obtention d’une erreur relative de 1% pour $\zeta = 0.1$ et le temps nécessaire à l’obtention d’une erreur relative de 1% pour $\zeta = 1$.

à l’émission du milieu est capitalisée tout le long du chemin optique, jusqu’à ce que la permutation algorithmique ait lieu. Ainsi, l’émission de l’ensemble du milieu d’intérêt est mieux prise en compte que si les émissions étaient traitées par roulette russe. En effet, dans le cas où les épaisseurs optiques d’absorption sont faibles, il était nécessaire, sans traitement déterministe, de parcourir un chemin optique important avant de rencontrer une émission et de réaliser un grand nombre de réalisations pour pouvoir être suffisamment représentatif de l’émission de la totalité du volume d’intérêt. Cela explique, pour ce type de milieu, l’accélération des temps de calcul engendrée par ce nouvel algorithme. Au contraire, lorsque l’épaisseur optique d’absorption est importante, la grande majorité des photons parvenant en \mathbf{x}_0 a été émise dans la zone proche de ce point. Un traitement par roulette russe de ces événements d’émission est alors pertinent ; le traitement déterministe n’aura pour seule conséquence une augmentation de la longueur des chemins parcourus avant que la réalisation soit stoppée, entraînant ainsi une augmentation des temps de calcul.

Dans les Tab. 4.3 et 4.4, une seule valeur du seuil ζ a été testée : $\zeta = 0.1$. Mais, diminuer la valeur ce seuil à 10^{-2} ou même 10^{-5} n’entraîne qu’un changement minime des temps de calcul. En effet, une fois que les chemins optiques ont atteint une paroi noire, le critère d’extinction ξ passe à 0 (quelle que soit la valeur de ζ) et l’algorithme permute vers la branche où les événements d’émission sont traités par roulette russe, mettant ainsi fin au chemin optique. La Fig. 4.13a illustre la dépendance du temps de calcul pour une erreur relative donnée au seuil ζ , pour une émissivité de paroi de 1 et pour le point sonde $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$. Des simulations

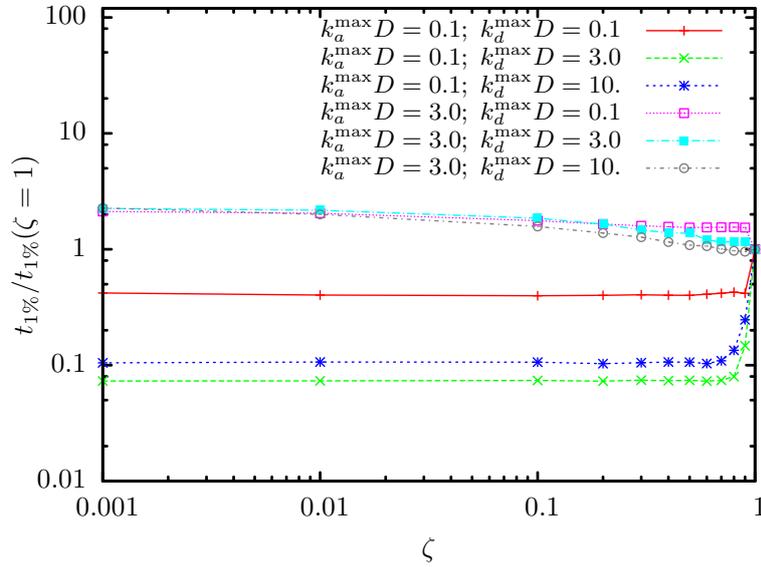
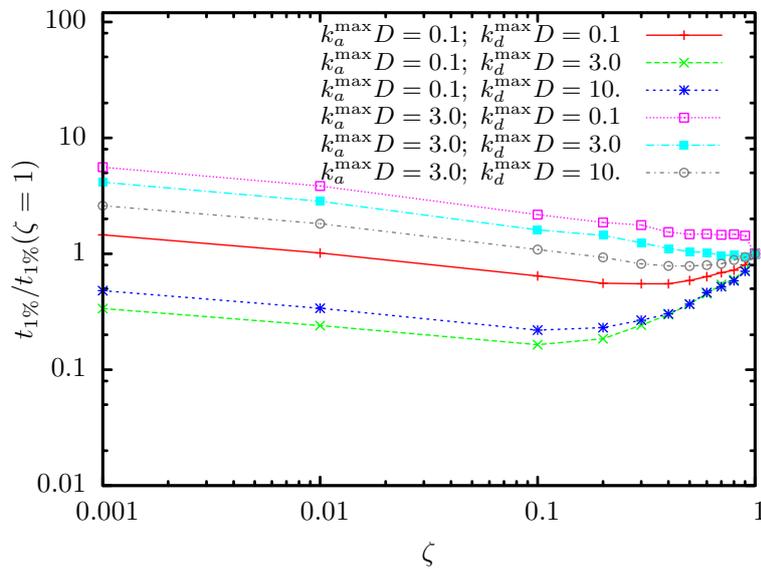
(A) $\varepsilon = 1$ (B) $\varepsilon = 0$

FIGURE 4.13 – Temps de calcul nécessaire à l’obtention d’une erreur relative de 1% en fonction du seuil ζ . Les temps affichés sont relatifs à l’estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l’algorithme de la Fig. 4.12 pour deux émissivités de parois : $\varepsilon = 1$ et $\varepsilon = 0$ et pour différentes épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion.

ont également été réalisées pour des parois parfaitement réfléchissantes ($\varepsilon = 0$). Les conclusions sont identiques aux précédentes, mais la sensibilité au choix du seuil ζ est plus importante (voir Fig. 4.13b). En effet, puisque les parois, désormais réfléchissantes, ne permettent plus de stopper les réalisations, les chemins parcourus avant que l'algorithme ne permute sont considérablement plus longs. Cela se traduit alors par une augmentation des temps de calcul lorsque ζ décroît.

Les résultats obtenus mettent donc en valeur le fait que traiter les émissions de façon déterministe, conduit à :

- une diminution de la variance de l'estimation (au moins dans le cas de faibles épaisseurs optiques d'absorption) : de l'information relative à l'émission du milieu est accumulée tout le long du chemin optique, jusqu'à ce que la permutation algorithmique ait lieu.
- une augmentation des temps de calcul pour une réalisation donnée : plus la valeur de ζ sera faible et plus la permutation algorithmique aura lieu tard. Les chemins considérés lors d'une seule réalisation indépendante seront alors plus longs, puisqu'aucune absorption ne permet de stopper la récursivité. Seul le basculement vers un traitement stochastique des collisions ou une paroi noire le permettront.

Les performances de la proposition algorithmique faite ici, quantifiées par les temps de calcul à 1%, sont donc dépendantes de ces deux phénomènes. Comme en atteste la Fig. 4.13, il est alors possible de déterminer une valeur optimale du seuil ζ , qui permet d'avoir le meilleur compromis entre diminution de la variance et augmentation du temps moyen par réalisation. Selon le type du milieu, sa valeur se situe entre 0.1 et 1. L'ajustement de la valeur de ζ , en fonction du cas d'étude d'intérêt, constitue alors un important levier d'optimisation (permettant, dans des cas particuliers, d'accélérer les calculs d'un ou plusieurs ordres de grandeur).

4.3.3.3 Influence des collisions nulles sur l'algorithme de type "energy partitioning"

Le nouvel algorithme introduit dans cette section (voir Fig. 4.12) permet également de traiter des occurrences négatives de coefficients de collision nulle. La Fig. 4.14 illustre la dépendance du temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% au paramètre $\rho = \hat{k}_\eta/k_\eta^{\max}$ pour $\zeta = 1$ (Fig. 4.14a) et $\zeta = 0.1$ (Fig. 4.14b). Nous nous concentrons ici, uniquement sur le point d'intérêt, $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$, identifié comme le point le plus pathologique (puisque situé dans la zone où les coefficients de collision nulle sont les plus faibles). Les parois sont également considérées comme noires et la fonction de phase comme isotrope. Les conclusions semblent identiques à celles formulées à la Sec. 4.3.2.4. Toutefois,

- pour $\rho < 1$ (*i.e.* quand le coefficient \hat{k}_η ne majore que localement le coefficient d'extinction réel), des difficultés de convergence plus importantes sont rencontrées pour des épaisseurs optiques d'absorption faibles et de diffusion importantes.
- pour $\rho > 1$ (*i.e.* le champ de \hat{k}_η est majorant en tout point), l'augmentation du nombre de collisions nulles (ρ croissant) entraîne une diminution du temps

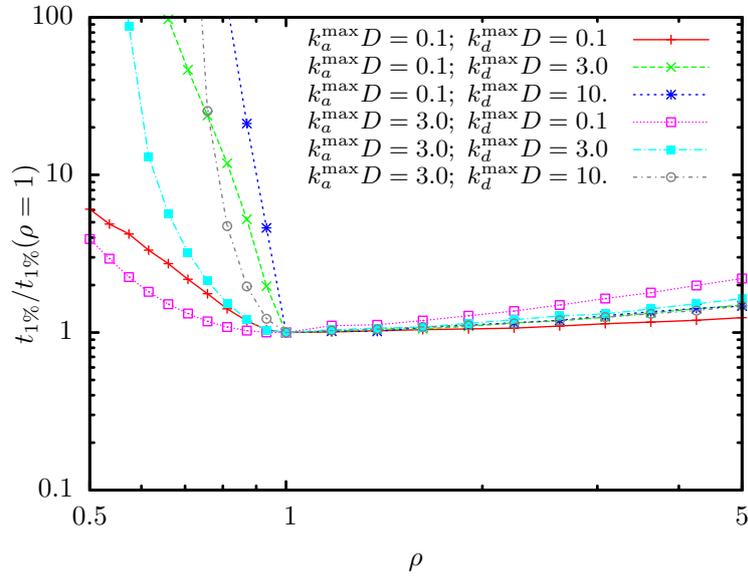
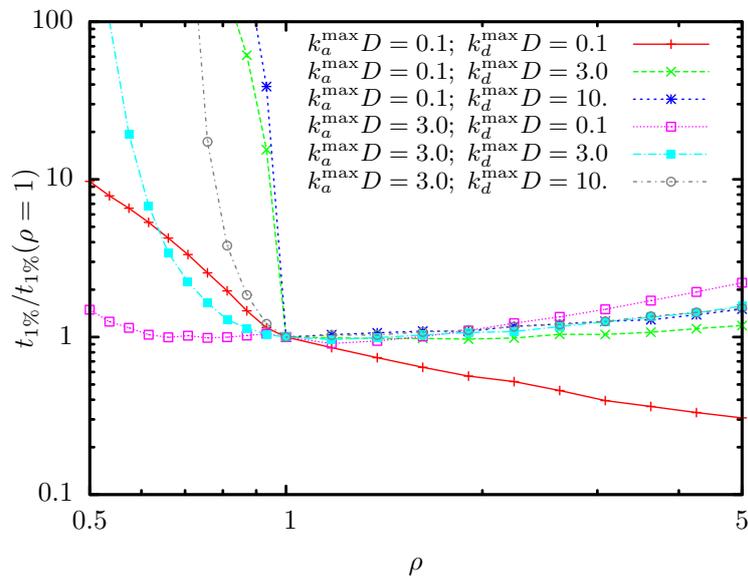
(A) $\zeta = 1$ (B) $\zeta = 0.1$

FIGURE 4.14 – Temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1% en fonction de la grandeur adimensionnelle $\rho = \hat{k}_\eta/k_\eta^{\max}$. Les temps affichés sont relatifs à l'estimation de $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ en $\mathbf{x}_0 = [-D, 0, 0]$ par l'algorithme de la Fig. 4.12 pour deux seuils de basculement algorithmique : $\zeta = 1$ et $\zeta = 0.1$ et pour différentes épaisseurs optiques d'absorption et de diffusion.

de calcul à 1%. En effet, plus le \hat{k}_η est important plus les libres parcours échantillonnés seront petits. Ainsi, le nombre répété de calculs des contributions d'émissions mène à une intégration quasi-déterministe le long du chemin optique qui réduit sensiblement la variance (en particulier lorsque les épaisseurs optiques sont minces).

4.3.4 Enseignements sur les choix du \hat{k}_η et du type d'algorithme

Cette étude paramétrique souligne l'importance qu'a le choix du champ de \hat{k}_η . On rejoint les conclusions émises à la [Sec. 4.2.4](#) : le champ de \hat{k}_η doit être choisi de sorte à être le plus proche du champ réel de coefficient d'extinction (pour éviter un trop grand nombre de collisions nulles) tout en permettant un échantillonnage aisé des libres parcours. Dans cette étude nous avons fait le choix de définir $\hat{k}_\eta(\mathbf{x})$ comme une fonction uniforme, mais il est imaginable de le définir comme une fonction uniforme ou même continue par morceaux. Il serait ainsi possible d'approcher plus précisément le champ d'extinction tout en garantissant un échantillonnage des libres parcours analytiquement possible, au prix d'un coût de calcul éventuellement plus important.

De plus, cette analyse a permis de mesurer l'augmentation de variance associée à un champ de \hat{k}_η non-majorant. Il semble donc évident que des cas de ce type doivent être évités autant que possible. Toutefois, le fait d'avoir ouvert la possibilité aux coefficients négatifs de collision nulle n'est pas pour autant injustifié. Assurer la majoration du champ d'extinction peut constituer une tâche très complexe comme nous allons le voir dans le [Chap. 5](#). Avec la proposition faite dans ce chapitre, nous pouvons désormais implémenter des algorithmes dont l'estimation ne sera aucunement biaisée si une occurrence du type $k_{n,\eta} < 0$ devait avoir lieu. Les quelques simulations, présentées dans cette étude paramétrique, indiquent que si le champ de \hat{k}_η majore en la plupart des points le coefficient d'extinction, mais pas strictement ($\rho \gtrsim 0.9$), l'augmentation du temps de calcul pour une précision donnée demeure mesurée.

Enfin, considérer les événements d'émission de façon déterministe (energy-partitioning) paraît être l'approche la plus efficace pour les milieux optiquement minces (qui représentent, pour des chambres de combustion de petite taille, une grande majorité des cas rencontrés). Dans la suite de ce manuscrit, cette technique sera systématiquement employée. La variété des épaisseurs optiques sera alors prise en compte en jouant sur le paramètre ζ pour optimiser le comportement de l'algorithme en fonction du cas d'étude.

4.4 Validation d'un solveur radiatif par les algorithmes à collisions nulles

Dans de nombreux domaines d'application (combustion, atmosphérique, etc.), les modèles radiatifs sont généralement couplés à d'autres modèles de transfert

thermique, de mécanique des fluides ou encore de cinétique chimique. Dans ces contextes, où la complexité due aux couplages est importante, il est souvent nécessaire de faire un compromis entre la précision attendue et les temps de calcul. Aussi, il est important d'évaluer la validité des méthodes numériques et des modèles résultant de ces compromis. Dans le cadre particulier du transfert radiatif, les méthodes de Monte-Carlo occupent une place de solution de référence, dans la mesure où les résultats sont fournis avec un intervalle de confiance. Très adaptées à la simulation du rayonnement en géométries complexes [Zhang *et al.*, 2009, Zhang, 2011, De La Torre *et al.*, 2014, Dauchet, 2012], elles sont aujourd'hui fréquemment utilisées pour valider des outils de simulation ou des modèles radiatifs approchés.

Toutefois, bien que considérées comme des méthodes de référence, leur prise en compte des hétérogénéités des propriétés des milieux peut conduire à certaines approximations (*ex* : discrétisation du milieu, voir [Sec. 4.1.2](#)). Les algorithmes à collisions nulles peuvent alors constituer une alternative intéressante aux méthodes usuelles de Monte-Carlo. En effet, ils tirent directement profit des avantages de ces dernières (incertitude numérique maîtrisée en permanence, gestion des géométries complexes, *etc.*), sans nécessiter une discrétisation du milieu ou d'autres techniques approchées. Ainsi, les estimations des observables d'intérêt sont non-biaisées et peuvent être réellement considérées comme résultats de référence.

4.4.1 Description du cas d'étude et de l'exercice de validation

Dans l'article [Eymet *et al.*, 2013] (donné en [Annexe E](#)), les auteurs proposent d'utiliser l'algorithme à collisions nulles, introduit à la [Fig. 4.12](#), pour valider le code PRISSMA [Poitou *et al.*, 2012], conçu pour des applications de combustion. Ce module de transfert radiatif, basé sur des méthodes aux ordonnées discrètes [Joseph *et al.*, 2005], est intégré au code de calcul AVBP, développé pour la simulation d'écoulements réactifs instationnaires sur des maillages hybrides [Cerfacs, 2014].

Dans le cadre de cet exercice de validation, un grand nombre de bilans radiatifs intégrés spectralement, sur tout le domaine infrarouge, sont calculés par les deux algorithmes (algorithme à collisions nulles et PRISSMA) en divers points d'une chambre de combustion dont la configuration retenue correspond à celle proposée par Knikker *et al.* [Knikker *et al.*, 2000, Nottin *et al.*, 2000, Knikker *et al.*, 2002]. Les dimensions de la chambre, illustrée à la [Fig. 4.15](#), sont de $300 \times 50 \times 80\text{mm}$ (respectivement le long des axes x , y et z). Un accroche-flamme triangulaire est positionné sur les côtés latéraux à une hauteur de 25mm . Un mélange d'air et de propane est injecté par le côté gauche et une flamme triangulaire se développe dans le conduit rectangulaire le long de l'axe x . Les températures de parois sont fixées à 300K , excepté pour la paroi de droite où la température est fixée à 1900K . La réflectivité des parois en céramique est fixée à $\varepsilon = 0.91$, celle des parois en quartz à $\varepsilon = 0.4$. L'émissivité de l'accroche-flamme est fixée à $\varepsilon = 0.4$, une valeur caractéristique d'un acier oxydé à 1000K . L'entrée, la sortie et l'atmosphère sont

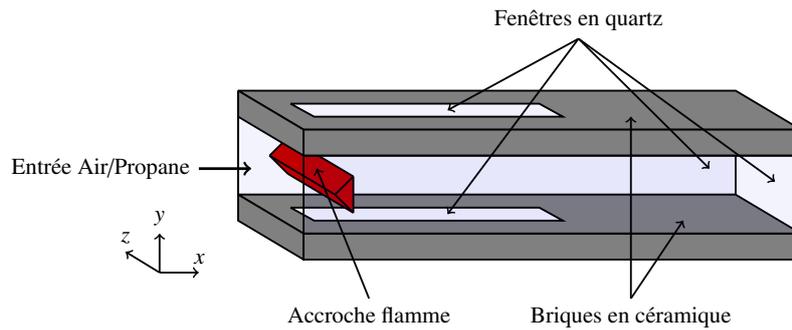


FIGURE 4.15 – Configuration de chambre de combustion retenue et proposée par Knikker et al. dans [Knikker *et al.*, 2000, Nottin *et al.*, 2000, Knikker *et al.*, 2002].

supposées se comporter comme des parois noires.

L'objectif de l'étude décrite dans [Eymet *et al.*, 2013] est alors de valider le code de transfert radiatif PRISSMA, dans lequel :

- la méthode de résolution de l'équation du transfert radiatif est une approche aux ordonnées discrètes (DOM),
- l'intégration spatiale s'appuie sur un maillage spécifique, plus grossier que le maillage LES^4 utilisé par le code AVBP. La stratégie de couplage avec AVBP est décrite plus en détail dans [Poitou *et al.*, 2012],
- l'intégration angulaire s'appuie sur le schéma de quadrature S_4 (seules 24 directions sont considérées),
- l'intégration spectrale est effectuée en utilisant un modèle "full-spectrum" (FSK) décrit par seulement 15 points de quadrature,
- les discrétisations spatiales, angulaires et l'intégration spatiale utilisées sont volontairement définies aux limites basses de leur domaine de validité afin de répondre aux exigences du code AVBP en termes de temps de calcul. Aussi, dans la pratique, le module PRISSMA doit être validé par un code de calcul radiatif à chaque fois qu'une nouvelle configuration de chambre de combustion est prise en considération.

par un algorithme à collisions nulles, dont :

- la structure algorithmique est strictement identique à celle présentée à la Fig. 4.12. Seule une étape préliminaire d'échantillonnage spectral est ajoutée, permettant d'intégrer le bilan radiatif sur tout le domaine infrarouge. Le champ du coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ est défini de sorte à rendre le champ d'extinction résultant $\hat{k}_\eta = k_{a,\eta} + k_{n,\eta}$ uniforme et majorant en tout point le champ du coefficient d'extinction réel ($k_{n,\eta} > 0$),
- le modèle d'intégration spectrale retenu repose sur une discrétisation par bande étroite et sur un modèle en k -distributions⁵. Ce choix représente la

4. LES : Large Eddy Simulation (simulation des grandes échelles).

5. Les données spectrales ont été produites en utilisant l'approche SNB-ck (statistical narrow-band correlated k) [Soufiani et Taine, 1997, Liu *et al.*, 2000, Liu *et al.*, 2001, Joseph *et al.*, 2009]

seule approximation faite pour cet algorithme de Monte-Carlo à collisions nulles. Idéalement, pour conserver son caractère de solution de référence, cet algorithme devrait utiliser une approche de type raie-par-raie (dont seules quelques tentatives sont rapportées dans la littérature [Wang et Modest, 2007b, Fomin, 2006]). Ainsi, l'intégration spectrale devrait s'appuyer sur des spectres haute-résolution produits (pour chaque jeu de concentrations, de température et de pression) à partir de bases de données spectroscopiques hautes-températures (*ex* : Hitemp ou CSDS). Cependant du fait de la difficulté et de la lourdeur engendrées par une telle approche, les *k-distributions* associées à une hypothèse de corrélation font encore fréquemment office de solutions de référence. Une proposition alternative à ces modèles, ne requérant aucune approximation et n'étant source d'aucun biais, sera proposée au [Chap. 5](#),

- les résultats sont obtenus sans aucune approximation relative à l'intégration directionnelle et spatiale (l'algorithme proposé ne nécessite la création d'aucun maillage),
- pour être en accord strict avec PRISSMA, les champs de propriétés (température et concentrations) utilisés en entrée de l'algorithme à collisions nulles sont ceux produits par la simulation *LES* du code AVBP [Poitou, 2009, Poitou *et al.*, 2011]. Ces champs de propriétés discrétisés (4.7 millions de tétraèdres) sont décrits par la [Fig. 4.16](#). Les schémas d'interpolations utilisés sont également identiques à ceux utilisés par PRISSMA.

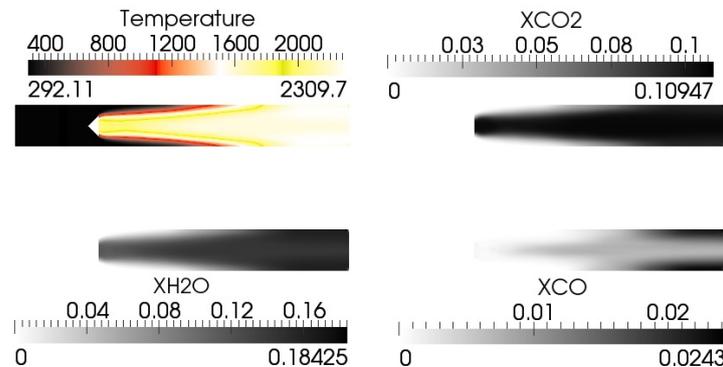


FIGURE 4.16 – Champs de température et de fractions molaires (CO₂, H₂O et CO) obtenus par le code de simulation aux grandes échelles AVBP pour la configuration de chambre de combustion considérée. Ces champs de propriétés sont utilisés en entrée de l'algorithme à collisions nulles. - Résultats obtenus par D. Poitou.

en séparant les différentes espèces (CO₂ et H₂O) grâce à une hypothèse de décorrélation spectrale. 367 bandes étroites de 25cm^{-1} de largeur, sont utilisées pour calculer les bilans radiatifs et les jeux de *k-distributions* sont construits en accord avec une quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 7. De plus amples détails concernant l'approche utilisée sont donnés dans l'article [Eymet *et al.*, 2013] fourni en [Annexe E](#)

4.4.2 Résultats obtenus

Les résultats obtenus, suite à cet exercice de validation, sont illustrés à la Fig. 4.17 où apparaissent les bilans radiatifs calculés par les deux codes en un grand nombre de points, le long de l'axe x ($y=0, z=0, x \in [0;0.3]$ m) et le long de l'axe y ($x=0.08, y \in [-0.025;0.025]$ m), $z=0$). Les résultats obtenus par l'algorithme à collisions nulles

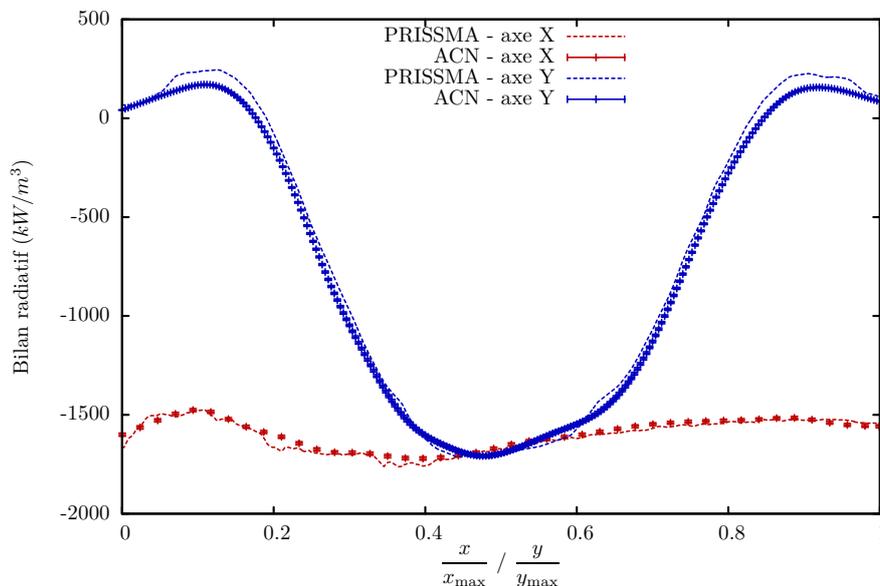


FIGURE 4.17 – Bilans radiatifs calculés par le code PRISSMA et l'algorithme à collisions nulles (fournis avec les intervalles de confiance correspondant) en différents points de la chambre de combustion, le long des axes x ($y=0, z=0, x \in [0;0.3]$ m) et y ($x=0.08, y \in [-0.025;0.025]$ m), $z=0$). Résultats obtenus par D. Poitou (pour PRISSMA) et par V. Eymet (pour l'algorithme à collisions nulles).

(fournis avec une barre d'erreur) semblent en bon accord avec ceux obtenus par PRISSMA. Les résultats ne diffèrent que de quelques pourcents dans les régions où les termes sources sont importants et ces disparités sont légèrement plus marquées sur les côtés de la chambre de combustion. Ces différences s'expliquent en partie par la discrétisation angulaire utilisée par PRISSMA, mais semblent n'avoir que très peu d'incidence sur la simulation globale de la combustion dans cette enceinte. Dans la mesure où l'on considère que le modèle spectral (SNB-ck) utilisé par l'algorithme à collisions nulles est fiable, les résultats produits par cet algorithme peuvent donc être considérés comme référence. Grâce à ces derniers, les spécialistes de la combustion peuvent alors affiner leur modèle radiatif en conséquence, dans la limite des exigences de temps de calcul fixées. On mesure alors l'intérêt majeur qu'offrent les solutions de référence tels que les algorithmes à collisions nulles.

Dans des considérations plus techniques, cet exercice de validation a également permis de mesurer l'impact non négligeable qu'ont les procédures numériques de localisation et d'interpolation. En effet, à chaque nouvelle collision, il est nécessaire de connaître les valeurs locales de pression, de température et de concentrations des différentes espèces, en s'appuyant sur les champs maillés produits par AVBP (fournis avec un schéma d'interpolation). Cette étape, consiste alors à identifier la maille,

parmi les 4.74 millions de tétraèdres, dans laquelle a lieu la collision et de réaliser une interpolation - ici barycentrique - pour chaque propriété afin d'en estimer sa valeur locale. La répétition consécutive de ces étapes de localisation⁶ peut alors représenter l'essentiel du temps de calcul, d'autant plus si la géométrie est comme ici tridimensionnelle. À titre d'ordre de grandeur, sans optimisation de ces procédures de localisation/interpolation, plus de 4 heures étaient nécessaires pour le calcul d'un seul bilan radiatif avec une erreur relative de 1%. Pour pallier ce problème, l'algorithme à collisions nulles a été implémenté dans l'environnement de développement EDStAR [De La Torre *et al.*, 2014, Starwest, 2014a], permettant de réaliser des simulations de Monte-Carlo en géométries complexes. Outre la bibliothèque MCM3D qui permet entre-autres de paralléliser les calculs de Monte-Carlo, cet environnement de développement inclut les bibliothèques de PBRT [Pharr *et Humphreys*, 2010] : un code de synthèse d'image comportant une multitude de procédures d'accélération graphique. Ainsi, grâce à ces procédures accélérant grandement l'étape d'identification de la maille d'intérêt, les temps de calcul ont été réduits de plusieurs heures à quelques dizaines de secondes (40 secondes environ) pour l'estimation d'un bilan radiatif ayant une erreur relative de 1%.

Résumé du chapitre

Lorsque les propriétés radiatives d'un milieu participant sont non-uniformes (telles que l'épaisseur optique d'extinction ne peut pas être évaluée analytiquement le long d'une ligne de visée), il est généralement nécessaire de recourir à certaines approximations (discrétisation des propriétés du milieu ou méthodes numériques de quadrature/inversion) pour résoudre l'équation du transfert radiatif en milieu participant. Dans un souhait de conserver le caractère de référence des méthodes de Monte-Carlo, nous avons, dans ce chapitre, adapté à des problématiques radiatives une technique employée depuis plusieurs décennies dans d'autres domaines de la physique du transport : les algorithmes à collisions nulles. Leur principe consiste à ajouter aux événements d'absorption et de diffusion un troisième type de collision sans effet sur le transfert du radiatif (ces collisions, dites nulles, peuvent être assimilées à des événements de diffusion vers l'avant). Puisque sans effet sur la physique du transport, elles peuvent être choisies arbitrairement de sorte à rendre le coefficient d'extinction résultant de ces trois types de collisions uniforme et ainsi permettre une résolution de l'équation du transfert radiatif rigoureuse, quels que soient les champs de propriétés utilisés en entrée. D'un point de vue purement statistique, ces collisions permettent, par l'introduction d'une récursivité, de passer outre la non-linéarité du terme exponentiel d'extinction présent dans l'équation du transfert radiatif. Ces algorithmes à collisions nulles ont alors été mis en œuvre dans l'étude d'un bilan radiatif au sein d'un milieu tridimensionnel, absorbant, émettant et diffusant, entouré par des parois réfléchissantes. Ces travaux ont donné lieu à une étude paramétrique permettant d'évaluer, entre-autres, l'influence non-négligeable du choix arbitraire du coefficient de collision nulle sur le taux de convergence de l'algorithme. Enfin,

6. Plusieurs dizaines de collisions pour chaque réalisation de l'algorithme de Monte-Carlo (quelques millions).

puisque ne faisant appel à aucune approximation, cette méthode a été utilisée pour valider un code de calcul radiatif approché dans une géométrie réaliste de chambre de combustion.