Étude du transfert radiatif dans les milieux ga-zeux

Caractères latins

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

xii Table des matières

\imath	Indice de la transition moléculaire	P	Puissance
	ou de la raie	P	Pression
${\mathcal I}$	Variable aléatoire associée aux	${\cal P}$	Terme puits
	transitions moléculaires	${\cal P}$	Probabilité discrète
j k	Indice de collision Coefficient d'extinction	\mathcal{P}_a	Probabilité d'absorption ou d'émission par le milieu
\hat{k}	Coefficient d'extinction incluant le	\mathcal{P}_d	Probabilité de diffusion
70	coefficient de collision nulle	\mathcal{P}_e	Probabilité d'absorption ou d'émis-
$ ilde{k}$	Coefficient d'extinction approché	, e	sion par la paroi
k_a	Coefficient d'absorption	\mathcal{P}_{\imath}	Probabilité associée à une transi- tion moléculaire
k_B	Constante de Boltzmann	\mathcal{P}_m	Probabilité associée à une espèce
k_d	Coefficient de diffusion	7 m	moléculaire
k_n	Coefficient de collision nulle	\mathcal{P}_n	Probabilité de collision nulle
l	Libre parcours ou distance	\mathbf{q}_r	Vecteur densité surfacique de flux radiatif
L	Luminance	Q	Énergie
L^{eq}	L^{eq} Luminance d'équilibre (ou de corps noir, ou de Planck)	r	Nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1
$\mathcal L$	Variable aléatoire de libre parcours	r	Fonction de répartition continue
m	Indice de l'espèce moléculaire	R	Rayon
M	Émittance	R	Fonction de répartition discrète
\mathcal{M}	Variable aléatoire associée aux espèces moléculaires	s	Écart-type d'échantillon
		S	Surface
n	Indice de réfraction	S_i	Intensité de raie
\mathbf{n}	Vecteur normal	S_n	Moment d'ordre n
N	Nombre de particules	S_r	Terme source radiatif
N_i	Nombre de transitions moléculaires	S_{\perp}	Surface normale
N_{mc}	Nombre de réalisations de Monte-	${\mathcal S}$	Terme source
	Carlo	t	Temps
N_m	Nombre d'espèces moléculaires	t	Temps de calcul
p	Densité de probabilité	$t_{1\%}$	Temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur relative de 1%
p_H	Densité de probabilité des nombres	T	Température
$p_{\mathcal{L}}$	d'onde Densité de probabilité des libres parcours	\mathcal{T}	Transmissivité
		u	Vecteur direction

Table des matières xiii

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

Caractères grecs

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

Indices

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

xiv Table des matières

\imath	Indice de la transition moléculaire	min	Minimal	
	ou de la raie	u	Supérieur	
i_{iso}	Indice isotopique	w	Relatif à une paroi	
j	Indice de collision	w		
l	Inférieur	η	Monochromatique (relatif à un nombre d'onde)	
m	Indice de l'espèce moléculaire	\imath	Indice de la transition ou raie d'in-	
max	Maximal	v	térêt	
Exposants				
_	Sortant	v	Dans le vide	
+	Entrant ou dans le sens positif			
Autres caractères				

Accents

Dérivée partielle

 ∂

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

 ∇

Gradient

CHAPITRE 1

Introduction

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

Étude du transfert radiatif dans les milieux gazeux

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

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

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

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

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

1.2 Hétérogénéité et dépendance spectrale : les principales difficultés

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

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

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

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

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

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

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

réel de reposer un problème sous un angle purement statistique.

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

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

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

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

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

1.3 Structure du manuscrit

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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