

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

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

Introduction

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.1.1 Incapacité d'échantillonner analytiquement des libres parcours

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

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

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

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

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

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

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

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

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

conduit à l'échantillon l_i suivant :

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

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

4.1.2 Alternatives couramment proposées

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

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

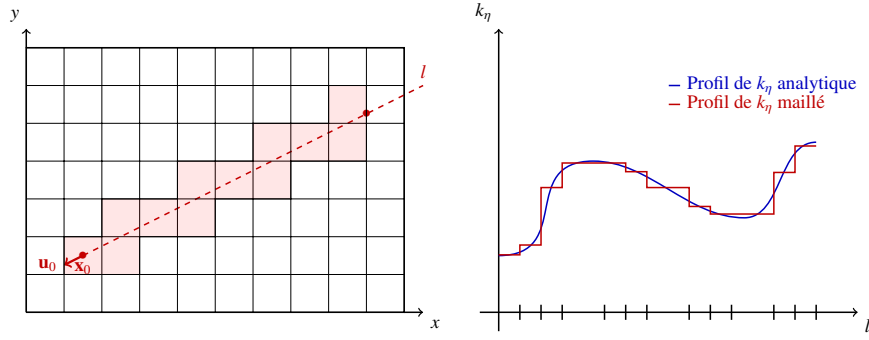


FIGURE 4.1 – Pour permettre un échantillonnage aisé des libres parcours, il est courant de discrétiser spatialement le milieu et d'approximer les champs de propriétés optiques comme uniformes à l'intérieur de chaque maille.

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

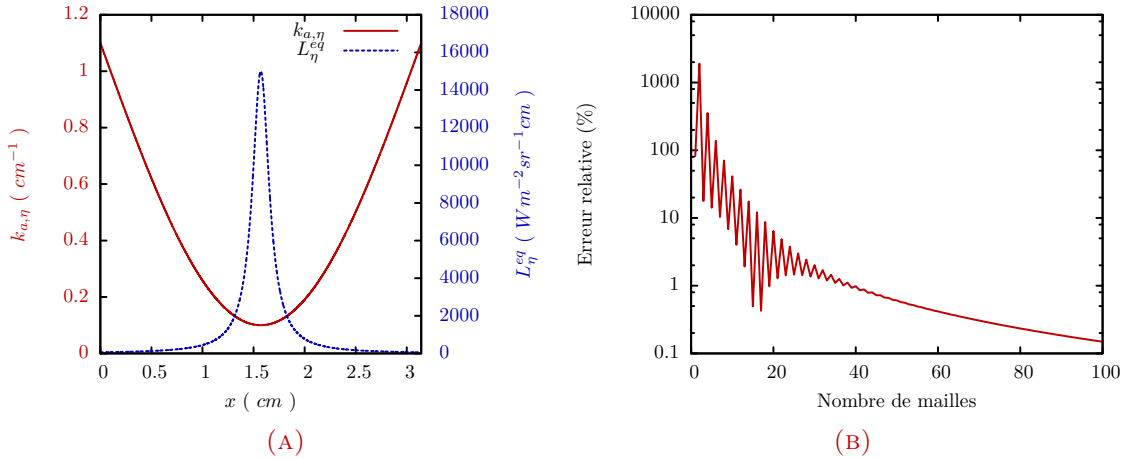


FIGURE 4.2 – Erreurs causées par la discrétisation des propriétés du milieu en fonction du nombre de mailles dans le cadre du calcul de la luminance $L_{\eta}(x = \pi, u^+)$ émise par un milieu participant monodimensionnel, non diffusant, défini sur $[0, \pi]$. Les profils analytiques de coefficient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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.2 Les algorithmes à collisions nulles

4.2.1 Historique des algorithmes à collisions nulles

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

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

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

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

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

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

4.2.2 Principe des algorithmes à collisions nulles

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

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

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

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

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

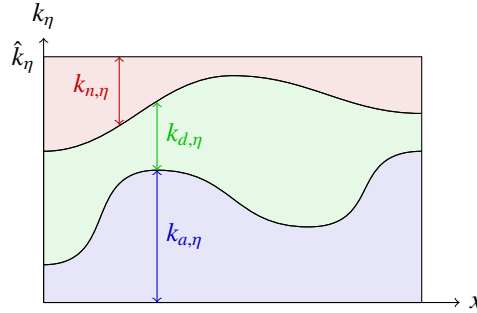


FIGURE 4.3 – Ajout d'un champ de coefficient de collision nulle $k_{n,\eta}$ au champ d'extinction réel $k_\eta = k_{a,\eta} + k_{d,\eta}$ de sorte à rendre le champ résultant $\hat{k}_\eta$ uniforme.

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

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

modifie cette dernière en :

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

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

4.2.3 Approche statistique des algorithmes à collisions nulles

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

avec

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

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

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

ALGORITHME

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

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

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

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

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

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

4.2.4 Vers des coefficients de collision nulle négatifs

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.3 Mise en application et étude paramétrique

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

4.3.1 Description du cas d'étude

4.3.1.1 Géométrie et champs de propriétés considérés

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

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

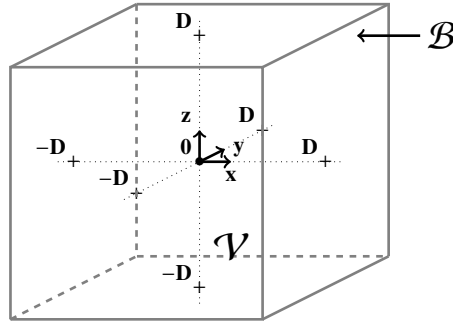


FIGURE 4.4 – La géométrie considérée correspond à un cube de côté $2 \times D$ partiellement réfléchissant (d'émissivité ε et de température T uniformes) dont le centre correspond à l'origine du repère cartésien. À l'intérieur de ce cube est présent un milieu hétérogène émettant, absorbant et diffusant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

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

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

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

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

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

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

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

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

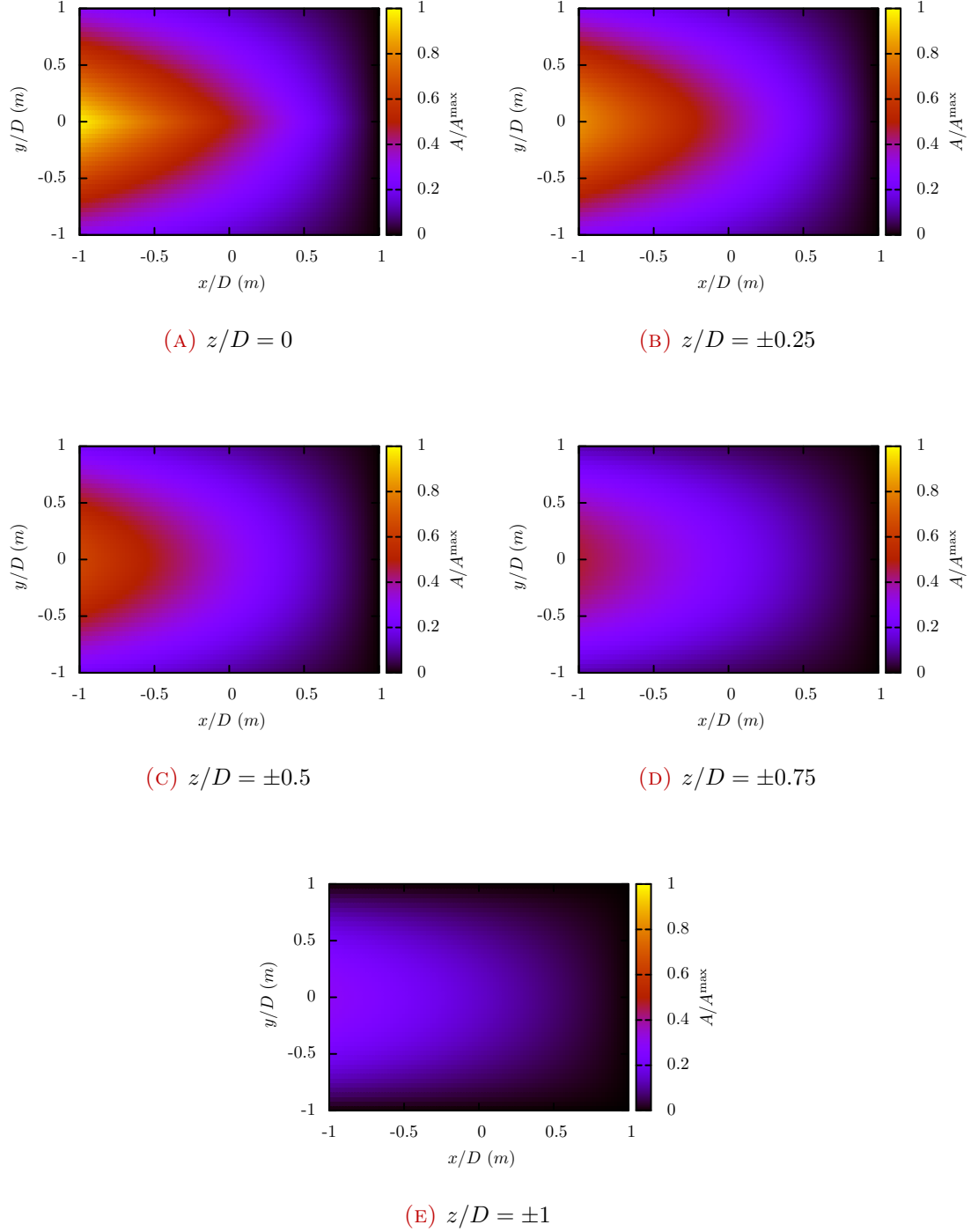


FIGURE 4.5 – Représentation adimensionnée des champs de coefficient d’absorption, de diffusion et de luminance d’équilibre pour différentes altitudes ($z = 0$, $z = \pm 0.25D$, $z = \pm 0.5D$, $z = \pm 0.75D$ et $z = \pm D$). Chacun d’entre eux est défini par la même expression : $A(\mathbf{x}) = A^{\max}(D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

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

4.3.1.2 Estimation d'un bilan radiatif monochromatique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

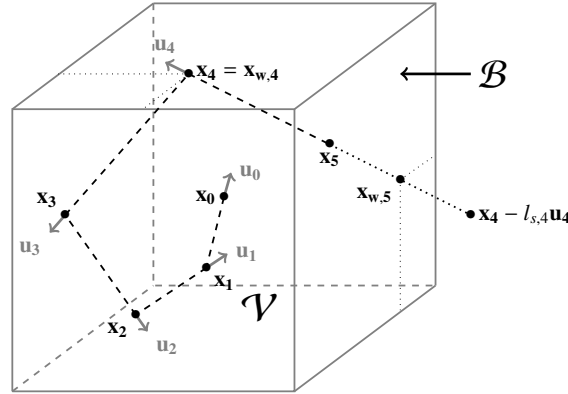


FIGURE 4.6 – Bilan radiatif en $\mathbf{x}_0$ sans ajout de collisions nulles. L'algorithme de Monte-Carlo consiste à suivre des photons depuis $\mathbf{x}_0$ dans l'ensemble des directions $\mathbf{u}_0$, jusqu'à ce qu'une position d'émission par le milieu (voir $\mathbf{x}_5$) ou par la paroi soit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

4.3.2 Traitement statistique du type de collision

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

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

$$\hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) = \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l_{j+1}\mathbf{u}_k) \exp\left(-\int_0^{l_{j+1}} \hat{k}_\eta(\mathbf{x}_j - l'_{j+1}\mathbf{u}_j) dl'_{j+1}\right) \quad (4.34)$$

où $\hat{k}_\eta = k_{a,\eta} + k_{d,\eta} + k_{n,\eta}$. Les conditions aux frontières ne seront pas modifiées mais une nouvelle probabilité de collision nulle $\mathcal{P}_n$ fera son apparition. Trois types de collisions pourront alors être rencontrés dans le milieu :

- des émissions (ou des absorptions, selon que l'on se place dans une description directe ou réciproque), de probabilité $\mathcal{P}_a = k_{a,\eta}/\hat{k}_\eta$,
- des diffusions, de probabilité $\mathcal{P}_d = k_{d,\eta}/\hat{k}_\eta$,
- des collisions nulles, de probabilité $\mathcal{P}_n = k_{n,\eta}/\hat{k}_\eta$,

Si l'on fait comme hypothèse, dans un premier temps, que le champ de $\hat{k}_\eta$ majore le champ du coefficient d'extinction maximal $k_\eta^{\max} = k_{a,\eta}^{\max} + k_{d,\eta}^{\max}$, les valeurs de $\mathcal{P}_a$, $\mathcal{P}_d$ et $\mathcal{P}_n$ sont comprises entre 0 et 1 et leur somme vaut bien 1 pour tout point $\mathbf{x}$. L'ajout de collisions nulles dans l'Eq. 4.30 n'entraîne pas de changement visible,

seule l'expression récursive de la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j)$ est modifiée :

$$L_\eta(\mathbf{x}_j, \mathbf{u}_j) = \int_0^\infty \hat{p}_{\mathcal{L}_{j+1}}(l_{j+1}) dl_{j+1} \times \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \notin \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{w,j+1}) \\ + (1 - \mathcal{P}_e(\mathbf{x}_{w,j+1})) \int_{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{w,j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \end{array} \right\} \\ + \mathcal{H}(\mathbf{x}_{j+1} \in \mathcal{V}) \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P}_a(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta^{eq}(\mathbf{x}_{j+1}) \\ + \mathcal{P}_d(\mathbf{x}_{j+1}) \int_{4\pi} \phi(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_j | \mathbf{u}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1}) d\mathbf{u}_{j+1} \\ + \mathcal{P}_n(\mathbf{x}_{j+1}) L_\eta(\mathbf{x}_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j) \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (4.35)$$

L'expression de ce bilan radiatif comme l'espérance d'une variable aléatoire $W(\mathbf{X}^*)$ demeure identique à celle que l'on avait avant l'ajout de collisions nulles (voir Eq. 4.32). Même si l'expression de la variable aléatoire $\mathbf{X}^*$, associée aux positions d'émission, reste inchangée, $\mathbf{X}^*$ est désormais définie par $\hat{p}_{\mathcal{L}}(l)$ et tient alors compte d'éventuelles collisions nulles. Cette formulation intégrale mène alors à l'algorithme présenté à la Fig. 4.7.

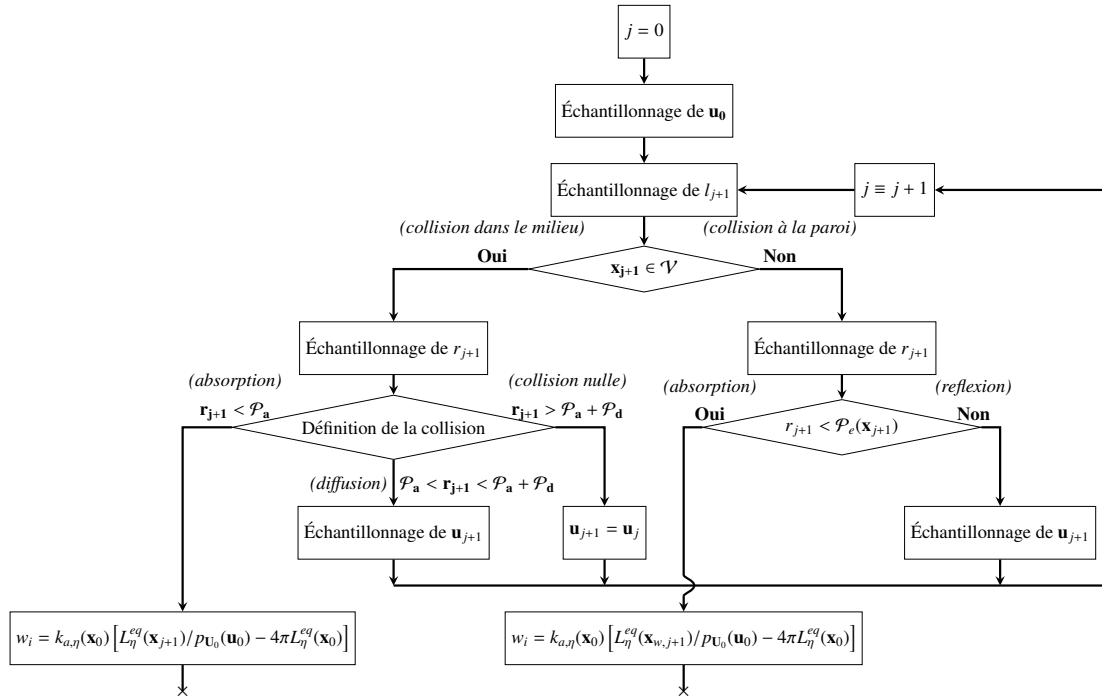


FIGURE 4.7 – Algorithme à collisions nulles usuel permettant d'estimer $S_{r,\eta}(\mathbf{x}_0)$ par un algorithme à collisions nulles usuel.